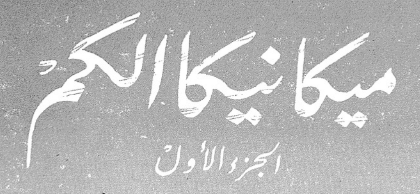
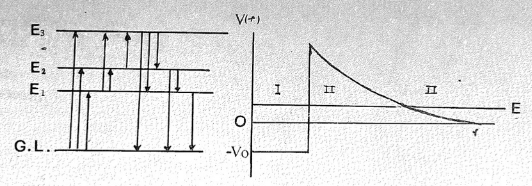




تأليف

دكتور محمد عبد الهادي العدوي
أستاذ الفيزياء النظرية
كلية التربية

دكتور عبد الرحمن فكري
أستاذ الفيزياء النووية والطاقة العالية
كلية الهندسة

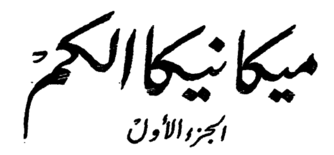
جامعة عين شمس

الطبعة الأولى

١٩٨٩

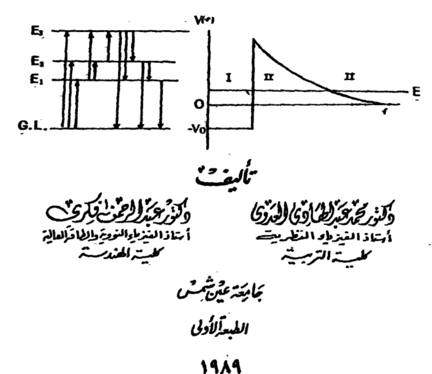
دار الحكيم للطباعة





ميكانيكا الكم

الجزء الأول



تأليف

دكتور محمد عبد الهادي العدوي
أستاذ الفيزياء النظرية
كلية التربية

دكتور عبد الرحمن فكري
أستاذ الفيزياء النووية والطاقة العالية
كلية الهندسة

جامعة عين شمس

الطبعة الأولى

١٩٨٩

دار الحكيم للطباعة

بسم الله الرحمن الرحيم

وبه نستعين

مقدمة

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على سيد المرسلين • ونشكره سبحانه وتعالى ان وفقنا لتقديم هذا الكتاب " ميكانيكا الكم ـ الجزء الاول " وهو الثانى فى سلسلة الكتب التى نسأله تعالى أن يساعدنا فى اتمامها لتزويد القارئ العربى بكتب عربية علمية على المستوى الجامعى •

ومرة اخرى راعينا ان نقدم هذا الكتاب باللغة العربية مع الابقاء على المعالجات الرياضية والقوانين الفيزيائية بحروف اللغة الانجليزية وذلك لسببين :

أولهما : ان نساعد القارئ على الاستفادة من المراجع الاجنبية المتاحة •

ثانيهما : ان المؤلفات العلمية الاجنبية على اختلاف اللغة المستخدمة فى كتابتها تسرد المعالجات الرياضية بحروف اللغة الانجليزية •

ونأمل باذنه تعالى ان يجنى القارئ العربى الفائدة المرجوة من وراء كتابه هذا المؤلف بهذه الصورة •

ويبدأ الكتاب بعرض الاساس الفيزيائى لنظرية ميكانيكا الكم بداية من مفهوم الكم الاشعاعى الذى ادخله العالم بلانك ووفق به لشرح الطيف الكهرومغناطيسى للاشعاع الصادر من الجسم تام السواد وكيف ان دى بروى استخدم وجهة النظر الخاصة بالتماثل بين الطاقة والمادة (كنتيجة من نتائج النظرية النسبية الخاصة لأينشتين) للتعرف على الخواص الموجية للجسيمات المادية • والصلة بين الحزمة الموجية لتلك الموجات وبين الجسيم المادى نفسه • وتطور ذلك الى مبدأ اللاتحديد لهايزنبرج •

وفى الباب الثانى يتم توضيح " بطريقة مبسطة بقدر الامكان " كيفية الوصول الى المعادلة الاساسية فى نظرية ميكانيكا الكم وهى معادلة شرودنجر والاشارة الى ماتتميز

به تلك المعادلة ومايتميز به الدالة الموجية التي تمثلها تلك المعادلة •

في الباب الثالث نعرض بعض الخصائص العامة للعاملات الخطية في ميكانيكا الكم وتلك العاملات ترجع اهميتها الى انها مايقابل الكميات الفيزيائية المعروفة كمتغيرات ديناميكية •

ثم في الباب الرابع نوضح بعض التطبيقات المبسطة لاستخدامات معادلة شرودنجر في معالجة بعض الظواهر الفيزيائية مثل حركة جسيم حر وحركة حزمة تجاه سلمة جهدية والتأثير النفقي •

اما الباب الخامس فنفرده لمعالجة موضوع المتذبذب التوافقي البسيط بينما الباب السادس يختص بمعالجة موضوع الذرات شبيهة ذرة الايدروجين •

وفي الباب السابع نوضح المعالجات التقريبية المعروفة باسم نظرية الاقلاق ولكن في ابسط صورها •

والكتاب يشتمل على عدد واحد وخمسين مثال محلول وزعت في آخر كل باب وراعينا في تنوعها تعميق المفهوم الفيزيائي الذي نود تبيانه في مكانه •

والكتاب ينتهي بثلاث تذييلات (Appendices)

التذييل الاول يعطي قيم بعض الثوابت الفيزيائية التي ورد استخدام معظمها في هذا الكتاب •

والتذييل الثاني لمحة عن مجموعة من العلماء البارزين الذين اسهموا في تشكيل اطار نظرية ميكانيكا الكم •

اما التذييل الثالث فيعطي قائمة ببعض الكتب التي استعان بها المؤلفان لتقديم هذا الكتاب "ميكانيكا الكم ــ الجزء الاول" •

والله سبحانه وتعالى هو وحده ولي التوفيق •

٢٦ شعبان ١٤٠٩ هجرية
٣ ابريل ١٩٨٩ ميلادية

المؤلفان
محمد عبد الهادي العدوي و عبد الرحمن فكري
جامعة عين شمس بالقاهرة

فهـــــرس

رقم الصفحة

رقم الصفحـــة

الباب الأول

منشأ ميكانيكا الكم

الباب الأول

منشا ميكانيكا الكم

ماهى ميكانيكا الكـــم ؟

ميكانيكا الكم هى المعالجة الرياضية لحركة جزيئات المادة (Matter Molecules) ومكوناتها من ذرات (Atoms) وأنويه (Nuclei) وجسيمات أوليـــة (Elementary Particles) مختلفة ٠

الاساس الفيزيائى لمكانيكا الكـــم :

فى الفترة من ١٩٠٠ م الى ١٩٢٣ م توصل العلماء الى مجموعة من الحقائـــق الفيزيائية المتعلقة بالاشعاع الكهرومغناطيســـى (Electromagnetic Radiation) تتلخص فى ظواهر التوزيع الطيفى لاشعاع الجسم التام السواد (Black-Body Radiation Phenomena) وظاهرة الانبعاث الكهروضوئى (Photoelectric Effect) وطيف ذرة الهيدروجين (Hydrogen-Atom Spectrum) وظاهرة استطارة كومتون (Compton Effect) التى لم يتم تفسيرها جميعـــا الا فى اطار الخاصية الجسيمية للاشعاع الكهرومغناطيسى التى قدمها العالم ماكس بلانـــك (Max Planck) عام ١٩٠٠ م لتفسير منحنيات طيف الاشعاع للجسم تام السواد ٠

ويتركز هذا الاطار فى الفرضين التاليين لبلانك :

١ ـــ ينبعث أو يمتص الاشعاع الكهرومغناطيسى فى صورة كمات (Quanta)، الطاقة E لكل كم (Quantum) منها تساوى حاصل ضرب ثابت بلانك h فى التـردد ν للاشعاع ٠ أى أن :

$$E = h\nu \tag{1.1}$$

حيث : $h = 6.625 \times 10^{-34}$ Joule.sec.

٢ ـ يفسر التوزيع الطيفي للاشعاع الصادر من جسم تام السواد درجة حرارتـــــه المطلقة T بواسطة العلاقة الرياضية التالية :

$$U(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi \nu^2}{C^3} \frac{h\nu}{(e^{h\nu/kT} - 1)} d\nu \qquad (1.2)$$

حيث : $U(\nu)$ هي الكثافة الحجمية للطاقة لوحدة مدى التردد ،

، $U(\nu)\, d\nu$ هي الكثافة الحجمية للطاقة في المدى من الترددات بين ν ، $\nu + d\nu$ معبرا عنها بالجول لكل متر مكعب.

، k هي ثابت بولتزمان (Boltzmann's constant) ويســـاوى $(1.38 \times 10^{-23}$ Joule/°K)

، C سرعة الضوء

وبذلك اتضح لاول مرة ان الاشعاع الكهرومغناطيسي والذى كان يعتقد دائما انه ينتشـر على صورة حركة موجيه ولاغنى عنها لفهم الكثير من الظواهر الاشعاعية مثل التداخــــل والحيود والاستقطاب • اتضح ان له في نفس الوقت خاصية جسيمية •

اى ان الاشعاع الكهرومغناطيسي يتصف بخاصية مزدوجـــــه (Duality Property) تتمثل في خاصية موجيه (Wave Property) واخرى جسيمـــــــة (Particle (or Corpuscular)Property) ولا يمكن لنا الاستغناء عن أى منهما •

وقد اوضح العالم الفرنسي لوى دى برولى (Louis de Broglie) نتيجــــة للتماثل الكوني ونتيجة التكافوء بين الطاقة E وكتلة m من اى مادة تبعــــــا لقانون اينشتين :

$$E = mC^2 \qquad (1.3)$$

أن جسيم مادة ما كتلته m ويتحرك بسرعة v نتوقع أن يتصف أيضا بخاصية ثنائيـــة

جسيمية وموجيه ويتمثل ذلك في علاقة دى برولى التالية والتى قدمها عام ١٩٢٤ :

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1.4)$$

حيث λ الطول الموجى (وهى خاصية موجيه) لموجه دى برولى المصاحبة لحركة هذا الجسيم

، p هى كمية الحركة الخطية (وهى خاصية جسيمية) وواضح أنها تعطى تبعا لسرعة الجسيم بالعلاقات التالية :

$$p = mv \qquad (1.5)$$

اذا كانت سرعة الجسيم v اقل بكثير من سرعة الضوء C .
بينما تعطى بالعلاقة :

$$p = \frac{m_o\, v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{C^2}}} \qquad (1.6)$$

اذا كانت سرعة الجسيم لايمكن اهمالها بالنسبة لسرعة الضوء حيث m_o هى الكتلة الساكنة (rest mass) اى كتلة الجسيم وهو ساكن .

وقد ثبت صحة العلاقة (1.4) من نتائج تجارب حيود الالكترونات التى حصل عليها العلماء ديفيصن وجِرْمَر (Davisson and Germer Experiment, 1927) والعالم طومْسون (G.P. Thomson, 1928)

بعض خصائص موجات دى برولى :

تتميز تلك الموجات بما يأتى :

١) تنتشر بسرعة طَوْر (Phase Velocity) اى سرعة انتشار صدر الموجه (ولنرمز لها بالرمز w) قيمتها دائما اكثر من سرعة الضوء فى الفراغ C ويتضح ذلك كما يلى :

نفرض ان السرعة الخطية لجسيم هى v وكمية حركته الخطية p وطاقته الكليــة E حيث

$$E = mC^2$$

$$p = mv$$

فمن التماثل بين الاشعاع والمادة يمكن التعبير عن الطاقة الكلية بعلاقة تشبه تمامــــا العلاقة الخاصة بطاقة الفوتون مع الاخذ فى الاعتبار ان سرعة الطور لموجات دى برولــى هى w بدلا من السرعة C فى حالة موجات الاشعاع الكهرومغناطيسى • وعلــى ذلك يكون :

$$E = h\nu = h\frac{w}{\lambda}$$

بينما

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$\therefore \quad mC^2 = \frac{h}{\lambda}w \qquad (a)$$

$$mv = \frac{h}{\lambda} \qquad (b)$$

وبقسمة هاتين المعادلتين يتضح ان

$$w = \frac{C^2}{v} = \frac{C}{v} \cdot C \qquad (1.7)$$

وبما ان C/v دائما اكبر من الواحد الصحيح (تبعا للنظرية النسبية الخاصـــــة لأينشتين) فان سرعة الطور w تكون دائما اكبر من سرعة الضوء C •

٢) تعتمد سرعة الطور w على الطول الموجى λ لموجات دى برولـــــى المصاحبة لاى جسيم متحرك تبعا للعلاقة الاتية :

$$w = C\sqrt{1 + \frac{m_o^2\,C^2}{h^2} \cdot \lambda^2} \qquad (1.8)$$

ومعنى ذلك ان تلك الموجات يحدث لها تشتت (Dispersion) حتى فى الفـــــراغ (Vacuum or Free Space) • ويمكن اثبات العلاقة (1.8) كما يلى :

نعلم من النظرية النسبية الخاصة ان الطاقة الكلية E لاى جسيم ترتبط بكميـــة حركته الخطية p وكتلته الساكنة m_o بالعلاقة الاتية :

$$E^2 = p^2C^2 + (m_oC^2)^2 \qquad (1.9)$$

وبالتعويض عن E ، p بما يقابلهما

$$E = h\nu = \frac{hw}{\lambda} \quad , \quad p = \frac{h}{\lambda}$$ نحصل على :

$$\left(\frac{hw}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 C^2 + (m_oC^2)^2$$

$$\therefore \quad w^2 = C^2 + (m_oC^2)^2 \frac{\lambda^2}{h^2}$$

$$\therefore \quad w = C\sqrt{1 + \frac{m_o^2C^2}{h^2}\lambda^2}$$

شكل (١-١) تكون الحزمة الموجية

وهى العلاقة (1.8) المطلوب اثباتها .

٣) تكون الحزمة الموجيه (Wave-Packet Formation) لموجـــات دى برولى المصاحبة لجسيم متحرك :

نعلم انه من المستحيل قياس كمية فيزيائية ما بدقة مطلقة (أى بدون خطأ ما) وعلى ذلك عند قياس كمية حركة p لجسيم ما تكون نتيجة القياس هى فى الحقيقـــة القيمة $p_o \pm \frac{\Delta p}{2}$ حيث Δp يمثل الخطأ فى تحديد قيمة p ومن علاقـــة دى برولى (1.4) يتضح ان موجات دى برولى المصاحبة لحركة هذا الجسيم تكـــون ذات اطوال موجيه مداها $\lambda \pm \frac{\Delta\lambda}{2}$ اى أن هناك طيفا من تلك الموجـــات تصاحب حركة هذا الجسيم ومعنى ذلك ان تلك الموجات سوف تتداخل مع بعضها تبعـــا لمبدأ تراكب الازاحات (Superposition Principle) المصاحب للحركات الموجيـــه . وهذه الموجات تُكَوّن مايسمى بالحزمة الموجيه (Wave Packet) وهى تمثل نوعـــا من الحركات الموجيه والتى فيها تكون سعة الموجه كبيرة جدا فى حيز صغير من انتشـــار

الموجه بينما تكاد تكون السعة مهملة في باقي الحيز الذى تنتشر فيه (انظــــــــر شكل ١ ـ ١) ٠

فاذا رمزنا بالرمز ψ_j لاى من تلك الازاحات لموجات دى برولى الصاحبــــة للجسيم المتحرك فانه تبعا لمبادىء الحركة الموجيه يمكن التعبير عن ψ_j بالعلاقــــة التالية :

$$\psi_j = A \exp\left[-i\ (\omega t - kx)\right] \qquad (1.10)$$

وكالمعتاد فان

A تساوى سعة الذبذبة ، (Amplitude)

، i تساوى $\sqrt{-1}$

، التردد الزاوى ω مرتبط بطاقة الجسيم الصاحبة له تلك الموجات كما يلي :

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi\ \frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar} \qquad (1.11)$$

، k هو متجه الموجه ويسمى ايضا متجه العدد الموجى (Wave Number or Wave Vector) ٠ وهذا المتجه مرتبط بكمية الحركة الخطية للجسيم كما يلي :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{\frac{h}{p}} = \frac{p}{\hbar} \qquad (1.12)$$

كما انه يمكن التعبير عنه كدالة للتردد الزاوى ω كما يلي :

$$k = k(\omega) = k_o + \Delta k = k_o + \left(\frac{\partial k}{\partial \omega}\right)_{\omega = \omega_o} \qquad (1.13)$$

حيث ω_o هى القيمة المتوسطة للتردد الزاوى ٠ وهو كمتجه يمكن كتابته علــــــى الصورة الاتية :

$$\vec{k} = \frac{\omega}{w^2}\vec{w} \qquad (1.14)$$

، x هو احداثى الموضع

ونتيجة تداخل جميع الازاحات ψ_j للموجات الصاحبة في مدى التردد الزاوى الصغير $\pm \frac{\Delta\omega}{2}$ حول القيمة المتوسطة ω_0 فان الازاحة المحصلة ψ عند لحظة معينة وموضع معين من حيز الانتشار تعطى كما يلى :

$$\psi = \sum_j \psi_j = \int A\, e^{-i(\omega t - kx)}\, d\omega \qquad (1.15)$$

$$\therefore \psi = \int_{\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2}}^{\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2}} A\, e^{\left[-i\left[(\omega_0+\Delta\omega)t - (k_0 + (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0})x\right]\right]} d\omega \qquad (1.16)$$

واذا افترضنا ان السعة A واحدة لجميع الموجات المتداخلة في هذا المدى الصغير $\Delta\omega$ فان

$$\psi = A\, e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2}}^{\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2}} e^{-i\left[(t - (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x)\Delta\omega\right]} d\omega \qquad (1.17)$$

واذا رمزنا للكمية $(\omega - \omega_0)$ بالرمز ξ فان

$$\xi = (\omega - \omega_0) = \Delta\omega \qquad (1.18)$$

$$، \quad d\xi = d\omega \qquad (1.19)$$

وبالتعويض من (1.18) ، (1.19) في (1.17) نحصل على :

$$\psi = A e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\frac{\Delta\omega}{2}}^{+\frac{\Delta\omega}{2}} e^{-i\left[(t - (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x)\xi\right]} d\xi \qquad (1.20)$$

$$\therefore \psi = A e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \left[\frac{e^{-i\left|(t - (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x)\right|}}{-i\left|(t - (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x)\right|} \right]_{-\frac{\Delta\omega}{2}}^{+\frac{\Delta\omega}{2}} \qquad (1.21)$$

$$= e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \left[\frac{A\, e^{-i\left[t + (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x\right]\frac{\Delta\omega}{2}} - e^{+i\left[t - (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x\right]\frac{\Delta\omega}{2}}}{-i\left[(t - (\frac{\partial k}{\partial\omega})_{\omega=\omega_0} x)\right]} \right] \qquad (1.22)$$

وبما أن :

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta$$

$$e^{+i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$\therefore\quad e^{-i\theta} - e^{+i\theta} = -2\,i\sin\theta \qquad (1.23)$$

وعلى ذلك تختصر معادلة (1.22) الى الصورة التالية :

$$\psi = \left[\frac{2A\sin\left\{\left(t - \left(\frac{\partial k}{\partial \omega}\right)_{\omega=\omega_0} x\right)\frac{\Delta\omega}{2}\right\}}{t - \left(\frac{\partial k}{\partial \omega}\right)_{\omega=\omega_0} x}\right] e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \qquad (1.24)$$

هذه المعادلة (1.24) تمثل حركة موجيه لها طَوْر (Phase) يتميز بتـــــردد زاوى متوسط ω_0 وعدد موجى متوسط k_0 بينما تتميز بسعة اهتزازه متغيره ويكـــون موضع قمتها متحركا بسرعة تحصل عليها بوضع :

$$t - \left(\frac{\partial k}{\partial \omega}\right)_{\omega=\omega_0} x = 0 \qquad (1.25)$$

فاذا رمزنا لتلك السرعة بالرمز u والذى يمثل مايسمى بسرعة الحزمة الموجيــــــه (Group Velocity) فاننا من المعادلة (1.25) نحصل على :

$$u = \frac{x}{t} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k}\right)_{\omega=\omega_0} \qquad (1.26)$$

<u>العلاقة بين سرعة الجسيم v وسرعة الحزمة الموجيه u لموجات دى برولـــــى المصاحبة لحركته :</u>

علمنا ان سرعة الطور w تعطى بالعلاقة :

$$w = C\sqrt{1 + a^2 \cdot \lambda^2} \qquad (1.8')$$

حيث

$$a^2 = \frac{m_o^2 C^2}{h^2}$$

وان التردد الزاوى ω يرتبط بسرعة الطور w ومتجه الموجه k علــــــى الصورة الاتية :

$$\omega = kw \qquad (1.11)$$

وبالاستفادة من (1.26) فان سرعة الحزمة الموجيه u يمكن الحصول عليهـــــا كما يلى :

$$u = \frac{\partial \omega}{\partial k} = k \frac{dw}{dk} + w$$

$$\therefore u = k \frac{dw}{d\lambda} \cdot \frac{d\lambda}{dk} + w \qquad (1.27)$$

$$\therefore u = k \left[\frac{C\ a^2\ \lambda}{1 + a^2\ \lambda^2} \right] \cdot \left[- \frac{2\pi}{k^2} \right] + w$$

$$\therefore u = -C \left(\frac{a^2\ \lambda^2}{1 + a^2\ \lambda^2}\right) + w \qquad (1.28)$$

وبالتعويض من (1.8') فى (1.28) نحصل على

$$u = -C \left[\frac{(\frac{w^2}{C^2} - 1)}{\frac{w}{C}} \right] + w$$

$$\therefore \quad u = \frac{C^2}{w} \qquad (1.29)$$

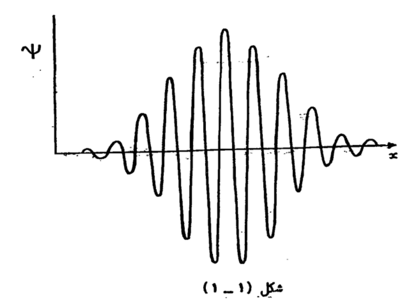
لكن من (1.7) لدينا

$$v = \frac{C^2}{w}$$

من ذلك يتضح ان :

$$u = v \qquad (1.30)$$

وهذه النتيجة الهامة توضح ان الجسيم والحزمة الموجيه المرتبطه به نتيجــــــة تداخل موجات دى برولى المصاحبة له اثناء حركته يكونان متلازمين ويتحركان بنفـــــس السرعة .



شكل (١ ـ ١)

وهذا يمكن فهمه على اساس ان الجسيم يكون محاطا بتلك الحزمة الموجيه اثناء حركته • وباعتبار ان احتمال تواجد الجسيم عند نقطة ما داخل حزمته الموجيه يتناسب مع مربع السعة عند تلك النقطة داخل الحزمة فهذا معناه عدم امكانية تحديد موضع الجسيم الا في حدود اتساع تلك الجزمة Δx الموضح بالشكل اعلاه • لذلك فان Δx تمثل الخطأ في تحديد موضع هذا الجسيم •

واذا ما أردنا تصغير هذا الخطأ فانه يستلزم زيادة المدى الطيفي $\Delta\lambda$ وهذا بدوره يؤدى الى خطأ اكبر Δp_x في تحديد كمية حركته الخطية المقابلة وهذا في حقيقته يعبر عن مبدأ هام من مبادئ ميكانيكا الكم وهو مبدأ اللاتحديد لهايزنبرج وسوف نتناوله فيما يلى :

مبدأ اللاتحديد لهايزنبرج (The Heisenberg Uncertainty Principle)

هذا المبدأ تقدم به العالم الالماني وارنر هايزنبرج عام ١٩٢٦ وينص على مايأتي :

" من المستحيل أن يتم في نفس اللحظة قياس متغيرين ديناميكيين مترافقين (Two Conjugate Dynamical Variables) إلا في حدود خطأ في كل منهما بحيث يكون حاصل ضرب هاذين الخطأين مساويا ان لم يكن اكبر من ثابت بلانك h (او ثابت ديراك ℏ حيث $\hbar = h/2$)

وكأمثلة لتلك المتغيرات الديناميكية المترافقة مايلي :

أ ـ احداثي الموضع للجسيم في اتجاه ما ومركبه كمية الحركة الخطية في نفس هذا الاتجاه مثل

(x, p_x) , (y, p_y) , (z, p_z)

ب ـ الطاقة الكلية E لجسيم ما والزمن t اللازم لتحديد تلك الطاقة .

حـ ـ الازاحة الزاوية ϕ لحركة جسيم في مدار ما ومركبه كمية الحركة الزاوية في الاتجاه العمودي على مستوى هذا المدار (L) .

والتعبير الرياضي لمبدأ اللاتحديد في قياس تلك المتغيرات المترافقة يكون على التوالي كما يلي :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \qquad (1.31)$$

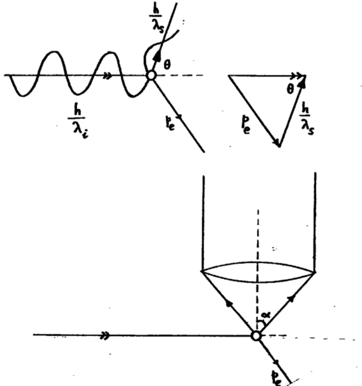
$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar \qquad (1.32)$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar \qquad (1.33)$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar \qquad (1.34)$$

$$\Delta \phi \cdot \Delta L \geq \hbar \qquad (1.35)$$

وسنحاول فيما يلي استنتاج احدى هذه العلاقات ولتكن العلاقة (1.31) :



شكل (١ـ٢) رسم توضيحي لاساسيات استطارة اشعاع كهرومغناطيس بواسطة الكترون "ساكن" تبعا لنظرية كومتون وبيان ذلك بالنسبة للعدسة الشيئية " في ميكروسكوب" بوهر ـ هايزنبرج .

لنتصور استخدام مجهر هايزنبرج لتحديد موضع الكترون منفصل عن موضع الكترون آخر مجاور له . (انظر شكل ١ ـ ٢) . ومعروف من مبادئ حيود الاشعاع (Radiation Diffraction Principles) ان قدرة تحليل المجهر (Microscope Resolving Power) أي أقل مسافة Δx بين جسيمين متجاورين بحيث يمكن رؤيتهما خلاله كجسيمين منفصلين عن بعضهما تُعطى بالعلاقة التالية :

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\mu \cdot \sin\alpha} \qquad (1.36)$$

حيث

Δx هي قدرة تحليل المجهر ·

λ الطول الموجى للاشعاع المرتد عن الجسم والداخل الى المجهر ·

μ هو معامل انكسار الوسط المحيط بالجسيمين المراد رؤيتهما كجسيمين منفصلين · وقيمته تساوى الوحدة للفراغ ·

α نصف زاوية مخروط الاشعاع المتجه الى شيئيه المجهر والمرتد عن الجسيم ·

فاذا ما أردنا تصغير المسافة Δx بقدر الامكان اى إذا ما أردنا جعل قدرة التحليل أفضل فان ذلك يتطلب اساسا استخدام اشعاع يكون طوله الموجى λ اصغر مايمكن وهذا معناه بالتالى زيادة احتمال حدوث استطارة كُومْبتون (Compton Scattering) لهذا الاشعاع بواسطة الالكترون المراد تحديد مكانه · ويصاحب هذه الاستطارة ارتداد هذا الالكترون بكمية حركة خطية يكون لها قيم فى اتجاه محور x فى المدى بين $(p_e)_x$ ، $(p'_e)_x$ حيث :

$$(p_e)_x = \frac{h}{\lambda_i} - \frac{h}{\lambda_s}\cos\theta$$

وبما ان $\theta = (\frac{\pi}{2} - \alpha)$

$$\therefore \quad (p_e)_x = \frac{h}{\lambda_i} - \frac{h}{\lambda_s}\sin\alpha \qquad (1.37)$$

وبالمثل

$$(p'_e)_x = \frac{h}{\lambda_i} + \frac{h}{\lambda_s}\sin\alpha \qquad (1.38)$$

وبطرح المعادلتين الاخيرتين نحصل على مدى الخطأ (p_x) فى تحديد كمية الحركة الخطية فى الاتجاه x كما يلى :

$$\Delta p_x = (p'_e)_x - (p_e)_x$$

$$\therefore \Delta p_x = \frac{2h}{\lambda_s} \sin\alpha \qquad (1.39)$$

وعلى ذلك من المعادلة (1.36) يكون حاصل ضرب الخطأين Δp_x ، Δx قيمته كالتالى :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\lambda_s}{2 \sin\alpha} \cdot \frac{2h}{\lambda_s} \sin\alpha = h$$

وهذه النتيجة احدى الصور التى ينص عليها مبدأ اللاتحديد لهايزنبرج .

مثال (١ ــ ١) :

وضح كيف يمكن استنتاج قانون بلانك باستخدام النتيجة الكلاسيكية التى ينص عليها قانون بولتزمان الاحصائى التالى (١٨٧٧) .

$$n_i = n_o \exp\left[-(e_i - e_o)/kT\right]$$

حيث

n_i هو عدد الجسيمات فى حيز ما التى تتصف بطاقة e_i

n_o هو عدد الجسيمات فى نفس الحيز التى تتصف بطاقة e_o ،

واذا اعتبرنا e_o تساوى صفرا فان العلاقة تصبح على الصورة :

$$n_i = n_o \exp\left[-e_i/kT\right]$$

الحــــل :

لنتصور حيزا يمثل التجويف الداخلى لفرن متزن حراريا عند درجة الحرارة المطلقة T وتطبيقا لفكرة العالم بلانك نتصور ان الطاقة الاشعاعية داخل هذا التجويف يحملها جسيمات ذات حركة تذبذبية وهى ما اسماها بلانك "كمّات الاشعـــــــــــاع" (Radiation Quanta) وكل كم اشعاع يحمل طاقـــــة $u_m = mu$

تساوى حاصل ضرب عدد صحيح m فى كمية صغيرة من الطاقة "u" تساوى hf حيث f هو تردد الحركة التذبذبية (المرتبطة) لهذا الكم ، h هو ثابت بلانك اى ان $u_m = m\,hf$ حيث m هو عدد صحيح يساوى صفر ، ١ ، ٢ ، ٣ ، ..... الى مالانهاية .

ولحساب متوسط الطاقة $\overline{W}$ التى يحملها أىّ منها : نا نقسم مجموع حاصل ضرب عدد الجسيمات المهتزة عند مستوى طاقة معين من قيمة تلك الطاقة على المجموع الكلى لاعدادها اى ان :

$$\overline{W} = \frac{\sum_{m=0}^{\infty} n_m \cdot u_m \quad (\text{مجموع الطاقات التى تحملها الكمات الاشعاعية})}{\sum_{m=0}^{\infty} n_m \quad (\text{مجموع عدد تلك الكمات})}$$

$$= \frac{\sum \left(n_o\, e^{-\frac{u_m}{kT}}\right) u_m}{\sum \left(n_o\, e^{-\frac{u_m}{kT}}\right)}$$

$$= \frac{\sum_{m=0}^{\infty} \left(n_o\, e^{-\frac{mhf}{kT}}\right) mhf}{\sum_{m=0}^{\infty} n_o\, e^{-\frac{mhf}{kT}}}$$

$$= \frac{\left[0 + (hf).e^{-\frac{hf}{kT}} + (2\,hf).e^{-\frac{2hf}{kT}} + (3\,hf)\,e^{-\frac{3hf}{kT}} + \dots\right]}{\left[1 + e^{-\frac{hf}{kT}} + e^{-\frac{2hf}{kT}} + e^{-\frac{3hf}{kT}} + \dots\right]}$$

$$= \frac{hf\,.\,\left(e^{-\frac{hf}{kT}}\right).\left[1 + 2\,e^{-\frac{hf}{kT}} + 3\,e^{-\frac{2hf}{kT}} + \dots\right]}{\left[1 + e^{-\frac{hf}{kT}} + e^{-\frac{2hf}{kT}} + \dots\right]}$$

$$= hf\,.\,e^{-\frac{hf}{kT}}\,.\,\frac{\left[1 - e^{-\frac{hf}{kT}}\right]^{-2}}{\left[1 - e^{-\frac{hf}{kT}}\right]^{-1}}$$

$$\therefore\ \overline{W} = \frac{hf}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1} \qquad (1.40)$$

وهذه العلاقة (1.40) هى ماتسمى بقانون بلانك لقيمة الطاقة المتوسطة التى تحملها الكمّات الاشعاعية ٠

وللحصول على قانون بلانك الذى يعطى مقدار الطاقة الاشعاعية $W_\lambda = \epsilon_\lambda d\lambda$ التى فى وحدة الحجوم من الحيز فى مدى الطول الموجى $(\lambda , \lambda + d\lambda)$ يجب علينا ان نضرب $\bar{W}$ فى عدد أنماط الحركة التذبذبية المتاحة فى وحدة الحجوم من هذا الحيز وهذا العدد تبعا للاشتقاق الرياضى الذى اجراه العالم الانجليزى رالى عبارة عن :

$$dn_\lambda = 8\pi \frac{d\lambda}{\lambda^4} \qquad (1.41)$$

وهذه العلاقة (1.41) هى ماتسمى بقانون بلانك للتوزيع الاحصائى للاشعاع من الجسم تام السواد Black-body-radiation Planck's distribution law

مثال (١ _ ٢) :

(أ) وضح أن قانون بلانك يؤول الى قانون ڤين (Wien's Law) فى حالة الأطوال الموجية الصغيرة (اى عند الترددات العالية) ٠

الحـــل :

قانون بلانك للتوزيع الاحصائى للطاقة الاشعاعية يكتب على الصورة التالية مع وضع $\frac{c}{\lambda} = f$:

$$\epsilon_\lambda d\lambda = \frac{8\pi ch \cdot \lambda^{-5}}{e^{\frac{ch}{\lambda kT}} - 1} d\lambda \qquad (1.42)$$

وفي حالة الاطوال الموجية الصغيرة فان هذا يعني :

$$\frac{ch}{\lambda kT} \gg 1 \quad , \quad e^{\frac{ch}{\lambda kT}} \gg 1$$

$$\therefore \quad \epsilon_\lambda d\lambda = \frac{8\pi\, ch \,.\, \lambda^{-5}}{e^{\frac{ch}{\lambda kT}}}\, d\lambda$$

$$= \frac{A_1 \,.\, \lambda^{-5}}{e^{A_2/\lambda T}}\, d\lambda \qquad (1.43)$$

حيث الثابت $8\pi\ ch = A_1$ ، الثابت الآخر $(ch/k) = A_2$

والمعادلة (1.43) هي مايعرف بقانون ڤين الكلاسيكي •

(ب) وضح أن قانون بلانك يؤول الى قانون رالى وجينز الكلاسيكـــــــــــي Rayleigh-Jeans Law في حالة الاطوال الموجية الطويلة

الحـــــل :

بما ان

$$e^{\frac{ch}{\lambda kT}} = 1 + \left(\frac{ch}{\lambda kT}\right) + \frac{1}{2\,!}\left(\frac{ch}{\lambda kT}\right)^2 + \dots$$

إذاً عندما تكون λ قيمها كبيرة فان الكمية $(ch/\lambda kT)$ تصبح اصغر بكثيـــر من ١ وعليه فان المقام في معادلة (1.42) يؤول الى $(ch/\lambda kT)$

$$\therefore \quad \epsilon_\lambda d\lambda = \frac{8\pi\, kT}{\lambda^4}\, d\lambda \qquad (1.44)$$

والمعادلة (1.44) هي مايعرف بقانون رالى وجينز الكلاسيكي •

مثال (١_٣) :

استنتج قانون ستيفان Stefan's Law من قانون بلانك .

الحل :

بما ان : $f = \frac{c}{\lambda} \qquad \therefore \quad df = -\frac{c\,d\lambda}{\lambda^2}$

$$\therefore \quad \epsilon_\lambda d\lambda = -\epsilon_f \, df = \frac{8\pi h \cdot f^3 \cdot df}{C^3 \,(e^{hf/kT} - 1)}$$

ويمكننا بذلك ايجاد الطاقة الكلية الاشعاعية في وحدة الحجوم من الحيز $W(T)$ كما يلي :

$$W(T) = \frac{8\pi h}{C^3} \int_o^\infty \frac{f^3}{e^{hf/kT} - 1}\, df$$

وبوضع hf/kT مساويا x

$$\therefore \quad f = \frac{kT}{h} \cdot x \qquad f^3 = \frac{k^3T^3}{h^3} \cdot T^3$$

$$, \quad df = \frac{kT}{h} \cdot dx$$

$$\therefore \quad W(T) = \frac{8\pi k^4 \cdot T^4}{C^3\, h^3} \int_o^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}\, dx$$

ويمكن اجراء التكامل كما يلي :

$$\int_o^\infty x^3 \cdot (e^x - 1)^{-1}\, dx$$

$$= \int_o^\infty x^3 \cdot \frac{e^{-x}\, dx}{1 - e^{-x}} = \int_o^\infty x^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}\, dx$$

حيث التكامل لاى من حدود المتسلسلة (وليكن ترتيبه) n هو :

$$\int_0^\infty x^3 e^{-nx} dx = \int_0^{\infty} x^3 \cdot d(e^{-nx}) \cdot \frac{-1}{n}$$

$$= \left\{ -\frac{1}{n^4} \left[\frac{n^3x^3 + 3n^2x^2 + 6nx + 6}{e^{nx}} \right] \right\}_0^\infty$$

$$= \left\{ -\frac{1}{n^4} \left[0 + 0 + 0 + 0 - (0 + 0 + 0 + \frac{6}{1}) \right] \right\}$$

$$= \frac{6}{n^4}$$

وعلى ذلك فان :

$$\int_0^\infty x^3 (e^x - 1)^{-1} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6}{n^4} = \frac{\pi^4}{15} \qquad (1.45)$$

$$\therefore \quad W(T) = \frac{8\pi k^4 \cdot T^4}{c^3 \cdot h^3} \cdot \frac{\pi^4}{15}$$

$$= \left(\frac{8\pi^5 k^4}{15 c^3 h^3}\right) \cdot T^4$$

$$= \sigma \cdot T^4 \qquad (1.46)$$

حيث (1.46) هو قانون بولتزمان وستيفان بينما الثابت σ المعروف بثابت ستيفان قيمته

$$= \frac{8 \pi^5 k^4}{15 c^3 h^3} = 5.67 \times 10^{-8} \quad watt.m^{-2}.deg.^{-4}$$

مثال (١ـ٤) :

اذا فرض تجويف مشع تام السواد على هيئة مكعب طول ضلعه ٢ سم ودرجة حرارة التجويف ١٥٠٠ °كلفن :

أ _ احسب عدد الانماط التذبذبية الموجودة في وحدة الحجوم داخل التجويف لمدى الطول الموجي بين ٤٥٩٥ ، ٥٠٠٥ أنجستروم (Å) .

ب _ ماهو متوسط الطاقة الاشعاعية الكلية داخل التجويف في هذا المدى ؟

الحل :

أ _ عدد الانماط التذبذبية في وحدة الحجوم داخل التجويف الاشعاعي هو :

$$dn = \frac{8\pi\, d\lambda}{\lambda^4}$$

حيث

$$\lambda = \frac{4595 + 5005}{2} = 5000\ \text{Å}$$

$$d\lambda = 5005 - 4595 = 10\ \text{Å}$$

$$\therefore\ dn = \frac{8 \times 3.14 \times (10 \times 10^{-10})}{(5 \times 10^{-7})^4} = 4.02 \times 10^{17}\ \ m^{-3}$$

ب _ لايجاد متوسط الطاقة الاشعاعية الكلية داخل التجويف في هذا المدى $\bar{\epsilon}_\lambda$ نوجد حاصل ضرب $\bar{w}$ (متوسط الطاقة الاشعاعية في وحدة الحجوم) في عدد الانماط الذى يوجد في الحجم الكلي للتجويف . وعلى ذلك :

$$\bar{w} = \frac{h\frac{c}{\lambda}}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}$$

$$= \frac{(6.625 \times 10^{-34}) \cdot (3 \times 10^{8}/5 \times 10^{-7})}{\exp\left[((6.625 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{8})/(5\times10^{-7})(1.38\times10^{-23})(1500))-1\right]}$$

$$\therefore\ \bar{\epsilon}_\lambda = \bar{w} \times dn \times \text{cavity volume} = 5.9 \times 10^{-15}\ \text{Joules.}$$

مثال (١_٥) :

أ _ اثبت ان طول موجه دى برولى λ المصاحبة لجسيم كتلته m ويتحرك بسرعة تساوى الجذر التربيعى لمتوسط مربع السرعات للتوزيع الاحصائى لجزيئات

غاز ما تبعا لماكسويل هو : $(\lambda = h / \sqrt{3 mkT})$

حيث T درجة الحرارة المطلقة للغاز ، k ثابت بولتزمان .

ب ـ ماقيمة λ اذا كان الجسيم نيوترونا ، درجة الحرارة للتوزيع الاحصائي لماكسويل هي ٢٠ ° سيلزيوس .

حـ ـ احسب زاوية الحيود لمثل هذه النيوترونات التي تحدث لها بواسطة المستويات الاساسية (Principal Planes) في بلورة أكسيد الماغنسيوم ـ وهي بلورة مكعبة ـ البعد d بين مستوياتها ٢,١٠١ أنجستروم .

الحـــل :

أ ـ من نتائج نظرية الحركة للغازات معلوم أن الجذر التربيعي لمتوسط مربع سرعات الجزيئات $v_{r.m.s}$ عبارة عن

$$v_{r.m.s.} = \sqrt{3 RT/M}$$

حيث R هو الثابت العالمي للغاز ، M الوزن الجزيئي الجرامي للغاز وهو يساوي حاصل ضرب عدد أفو جادرو N_A في وزن جزيء واحد m من جزيئات الغاز

$$\therefore \quad v_{r.m.s.} = \sqrt{3 RT/m N_A} = \sqrt{3 kT/m}$$

اذاً بالتعويض في معادلة دي برولي على فرض ان الجسيم المعطى يتحرك بسرعة مساوية للسرعة v_{rms} فان :

$$\lambda = \frac{h}{m.v_{rms}} = \frac{h}{\sqrt{3 m.kT}}$$

ب ـ اذا كان الجسيم نيوترونا اى ان الكتلة m تساوى ١٨٣٨ مرة مثل كتلة الالكترون الساكنة اذاً :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3\ mkT}} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\ J.sec.}{\sqrt{3\ (1838 \times 9.1 \times 10^{-31} kg).(1.38 \times 10^{-23} J/°K)(293°K)}}$$

$$= \frac{6.63 \times 10^{-34}}{4.51 \times 10^{-24}} = 1.47 \times 10^{-10}\ m = 1.47\ \text{Å}$$

حـ ـ تبعا لقانون براج (Bragg's Law) للحيود فى البلورات فان :

$$2\ d\ .\ \sin \theta_n = n \lambda$$

حيث d هى المسافة الفاصلة بين مستويات الذرات التى حدث عندهـــا الحيود ، θ_n هى زاوية الحيود للرتبة n ولنفرض ان $n = 1$ اذا

$$2\ .\ (2.101 \times 10^{-10})\ .\ \sin \theta_1 = 1 \times 1.47 \times 10^{-10}$$

$$\therefore \sin \theta_1 = \frac{1.47 \times 10^{-10}}{4.202 \times 10^{-10}} = 0.3498$$

$$\therefore \theta_1 = 20.4°$$

مثـال (١ ـ ٦) :

جسيم الفا ينطلق من نواه ذرة الراديوم ٢٢٦ بطاقة حركة ٥,٧٨ مليـــون الكترون فولت :

أ ـ احسب طول موجه دى برولى المصاحبة لهذا الجسيم •

ب ـ قارن بين هذا الطول وقطر النواه المنطلق منها •

الحـــل :

أ ـ طول موجه دى برولى المصاحبة لجسيم الفا :

$$\lambda = \frac{h}{p_\alpha} = \frac{h}{\sqrt{2\, m_\alpha\, E_\alpha}}$$

$$= \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2.(4 \times 1837 \times 9.1 \times 10^{-31}).(5.78 \times 10^{6} \times 1.6 \times 10^{-1}}}$$

$$= \frac{6.63 \times 10^{-34}}{1.11 \times 10^{-19}} = 5.97 \times 10^{-15} \quad m$$

ب ـ قطر النواه المنطلق منها جسيم الفا نحسبه من المعادلة التالية :

$$D = \text{Diameter of redium-226} = 2 \,.\, (r_o \,.\, A^{1/3})$$

$$\therefore \quad D = 2 \,.\, (1.25 \times 10^{-15} \times (226)^{1/3})$$

$$= 2 \times 1.25 \times 6.08 \times 10^{-15} = 15.2 \times 10^{-15} \text{ m}$$

$$\therefore \quad \lambda/D = \frac{5.97 \times 10^{-15}}{15.2 \times 10^{-15}} = 0.393$$

مثـــال (١ ـ ٧) :

استنتج مبدأ اللاتحديد لهايزنبرج باستخدام ظاهرة تأثير دُوبْلَـــــــــــــــر المرتبطة بتردد الاشعاع الكهرومغناطيسي الذى يصدر مـــن Doppler Effect • ذرة غير مستقرة •.

الحـــل :

الاشعاع الصادر من الذرة نتيجة انتقالها من حالة مضطربة الى حالة أقل اضطرابا واثناء تحركها بسرعة v يكون تردده الظاهرى :

$$f = f_o\,(1 + \frac{v}{c})$$

حيث f_o التردد عندما تكون v مساوية للصفر ، c سرعة الضوء •

وبما ان عملية قياس التردد تستغرق فترة زمنية ΔT فمعنى ذلك ان هناك خطأً في تحديد التردد f مقداره :

$$\Delta f = \frac{1}{\Delta T} = f - f_o = \frac{f_o\, v}{c}$$

وخلال تلك الفترة تتحرك الذرة مسافة Δx مقدارها :

$$\Delta x = v \cdot \Delta T = v \cdot \frac{c}{f_o\, v} = \frac{c}{f_o}$$

وحيث ان طاقة الفوتون hf_o وكمية تحركه الخطي (hf_o/c) بينما ترتد الذره المسافة Δx بحيث يتحقق قانون بقاء كمية التحرك الخطي فان :

$$Mv = \frac{h\, f_o}{c} = \Delta p_x \qquad (\text{كتلة الذرة} = M)$$

$$\therefore \; \Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{c}{f_o} \cdot \frac{h\, f_o}{c} = h$$

مثـال (١ ـ ٨) :

يتحرك الالكترون في ذرة الايدروجين في الحالة المثارة $n = 2$ ويظل كذلك لفترة زمنية 10^{-8} ثانية قبل ان يهبط الى المستوى العادى • احسب مقدار اللا تحديد في قيمة الطاقة للحالة $n = 2$ • هل هذا المقدار يمثل تصحيح ذى أهمية في نظرية بوهر التى تتوقع القيمة $(-3.39\ eV)$ ؟

الحـــل :

اذا رمزنا للفترة الزمنية 10^{-8} ثانية على انها مقدار اللا تحديد Δt في عمر الحالة المثارة للذرة المعطاه ، ΔE مقدار اللاتحديد المقابل في قيمة الطاقة للحالة $n = 2$ •

$$\therefore \Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

$$\therefore \Delta E \sim \frac{h}{\Delta t} = \frac{1.056 \times 10^{-34} \ J.s}{10^{-8} \ s} = 1.056 \times 10^{-26} \ J$$

$$= \frac{1.056 \times 10^{-26} \ J}{1.6 \times 10^{-19} \ J/eV} = 6.6 \times 10^{-8} \quad eV$$

وواضح ان هذا المقدار ΔE صغير جدا بالنسبة للقيمة المتوقعة تبعا لنظرية بوهر وهي 3.39- الكترون فولت ٠

مثال (١ ـ ٩) :

الكترون طاقة حركته تساوى : (أ) 15 الكترون فولت ، (ب) 15 مليون الكترون فولت ٠

احسب لكل حالة سرعة الطور لموجات دى برولى المرتبطة بحركة الالكترون ٠

الحل :

أ ـ بما أن طاقة حركة الالكترون المعطاء في تلك الحالة هى 15 الكترون فولت فقط بينما طاقة الكتلة الساكنة للالكترون هى 0.51 مليون الكترون فولت اذاً يمكننا تطبيق العلاقات النيوتونية وعليه :

$$\therefore \quad \lambda_1 = \frac{h}{p_1} = \frac{h}{\sqrt{2 m_e E_e}} = \frac{6.625 \times 10^{-34}}{\sqrt{2.(9.1\times10^{-31}).(15\times1.6\times10^{-19})}}$$

$$= 3.2 \times 10^{-10} \ m = 3.2 \ Å$$

$\because$ سرعة الطور w_1 للموجات المصاحبة لحركة الالكترون فى هذه الحالة هى :

$$v_1 = c\sqrt{1 + \frac{m_o^2 c^2 \lambda_1^2}{h^2}} = 3 \times 10^8 \sqrt{1 + \frac{(9.1x10^{-31})^2 (3x10^8)^2 (3.2x10^{-10})}{(6.625 \times 10^{-34})^2}}$$

$$= 3 \times 10^8 \sqrt{1 + 17300.0} = 3.95 \times 10^{10} \quad m/s$$

ب ــ في هذه الحالة طاقة الحركة المعطاه هي 15 مليون الكترون فولت اى حوالى ثلاثين مرة قدر طاقة الكتلة الساكنة للالكترون ($m_o c^2$) اذاً يجب علينا معاملة الالكترون في هذه الحالة تبعا لقوانين أينشتين النسبية وعلى ذلك فان الطاقة الكلية للالكترون هي 15.51 مليون الكترون فولت • وبتطبيق علاقة أينشتين التي تربط بين تلك الطاقة الكلية E وكمية الحركة الخطية p_2 نحصل على :

$$p_2 = \frac{\sqrt{E^2 - (m_o c^2)^2}}{c}$$

$$= \frac{\sqrt{(15.51x10^6 x1.6x10^{-19})^2 - (0.51x10^6 x1.6x10^{-19})^2}}{3 \times 10^8}$$

$$= \frac{1.6 \times 10^{-13}}{3 \times 10^8} \sqrt{(15.51)^2 - (0.51)^2} = 8.22 \times 10^{-21} \ kg.m.s^{-1}$$

$$\therefore \lambda_2 = \frac{h}{p_2} = \frac{6.625 \times 10^{-34}}{8.22 \times 10^{-21}} = 8.06 \times 10^{-14} \ m$$

$$\therefore w_2 = 3 \times 10^8 \quad 1 + \frac{(9.1x10^{-31})^2 . (3x10^8)^2 . (8.06x10^{-14})^2}{(6.625 \times 10^{-34})^2}$$

$$= 3 \times 10^8 \times 1.0005 = 3 \times 10^8 \quad m.s^{-1}$$

ومنه يتضح ان عندما يصغر الطول الموجي لموجات دى برولى المصاحبة للجسيمات الاولية نتيجة ازدياد طاقة حركتها فان سرعة الطور لتلك الموجات تقرب من سرعة الضوء ولاتزيد عنها الا بمقدار صغير للغاية •

الباب الثانى

المعادلة الموجبة لدالة الحالة

الباب الثانى

المعادلة الموجية لدالة الحالة

المعادلة الموجيه لدالة الحالة

معادلة شرودنجر (The Schrödinger Equation)

نعلم انه لاى حركة موجيه توجد معادلة تفاضلية مناسبة تعبر عنها • فمثلا فى حالة انتشار موجات صوتيه فى اتجاه الاحداثى السينى x فان المعادلة التى تمثل تلك الحركة وتربط بين الازاحة ξ (فى اتجاه x) واحداثى الزمن t وسرعة الموجه v هى :

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \qquad (2.1)$$

بينما فى حالة انتشار الموجات الكهرومغناطيسية المستقطبه فان الحركة الموجيه للمجالين الكهربى والمغناطيسى المتلازمين فيها توصف بالمعادلتين التاليتين :

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} = C^2 \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} \qquad (2.2)$$

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial t^2} = C^2 \frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} \qquad (2.3)$$

حيث C تمثل سرعة انتشار الاشعاع الكهرومغناطيسى

، E_y شدة المجال الكهربى ، H_z شدة المجال المغناطيسى •

ولكن مثل هذه المعادلات الموجية وجدت غير مناسبة لتمثيل الحركة الموجيه لموجات دى برولى المصاحبة لاى جسيم متحرك (انظر مثال ٢ ــ ٢) •

مثـــال (١ ـ ١٠) :

احسب الفترة الزمنية التي يسمح بها مبدأ اللاتحديد لميزون باى المتعـــادل (π°) للتواجد على هيئة زوج من بروتون وبروتون مضاد •

الحـــل :

$$\therefore \Delta E . \Delta t \sim h \quad , \quad \Delta E = (m_p + m_{\bar{p}})\, c^2$$

$$\therefore \Delta t = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{2\times3.14\times2\times1838\times9.1\times10^{-31}\times9\times10^{16}} = 3.5\times10^{-25} \text{ sec.}$$

مثـــال (١ ـ ١١) :

الكترون طاقة حركته ١٥٠ الكترون فولت يمر خلال فتحة دائرية نصف قطرهـــــا r = ١,٢ ميكرون • احسب مقدار اللاتحديد الذى يطرأ على زاوية خروجه من الفتحة •

الحـــل :

علاقة مبدأ اللاتحديد التى تربط بين اللاتحديد فى الزاوية $\Delta\theta$ واللاتحديد فى كمية التحرك الزاوى ΔL هى :

$$\Delta\theta . \Delta L \sim \hbar$$

حيث يمكننا وضع

$$\Delta L = m_e v r$$

$$\therefore \Delta\theta = \frac{\hbar}{m_e v r} = \frac{\lambda}{r}$$

ولكن $$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{2.(9.1\times10^{-31}).(150\times1.6\times10^{-19})} = 0.1\times10^{-9}\ m$$

$$\therefore \Delta\theta = \frac{0.1 \times 10^{-9}}{1.2 \times 10^{-6}} = 0.000083 \text{ radian} = 0.0048 \text{ degree}$$

مثـــال (١ ـ ١٢) :

عين باستخدام مبدأ اللاتحديد امتداد الحيز الذى تشغله ذرة الهيدروجيـــن وقيمة ادنى مستوى للطاقة ·

الحـــل :

اذا فرضنا ان الالكترون متواجد فى المتوسط على بعد r من البروتـــون فان كمية الحركة الخطية له تكون p بحيث

$$p = \frac{\hbar}{r}$$

اذاً طاقة الحركة K.E. يمكننا التعبير عنها بالصورة :

$$K.E. = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

وحيث ان القوة الكهربية التى بين الالكترون والبروتون تكسب الالكترون طاقة وضع P.E. :

$$P.E. = -\frac{1}{4\pi\epsilon_o}\frac{e^2}{r}$$

اذاً الطاقة الكلية W_r للالكترون :

$$W_r = -\frac{1}{4\pi\epsilon_o}\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

وعليه فان ادنى مستوى طاقة W_{r_o} لذرة الايدروجين يمكن الحصول عليه بمســـاواه تفاضل W_r بالنسبة للمسافة r بالصفر، أى ان :

$$\left(\frac{dW_r}{dr}\right) = \frac{1}{4\pi\epsilon_o}\frac{e^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{m\,r^3} = 0 \qquad , \quad r = r_o$$

$$\therefore \quad r_o = \frac{4\pi\epsilon_o\hbar^2}{me^2}$$

$$= \frac{4x3.14x8.85x10^{-12}x(1.15x10^{-34})^2}{9.1x10^{-31}\ x\ (1.6\ x\ 10^{-19})^2} = 6.31\ x\ 10^{-11}\ m$$

وباستخدام هذه القيمة نستطيع الحصول على قيمة ادنى مستوى للطاقة W_{r_o} :

$$W_{r_o} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_o}\cdot\frac{e^2}{r_o} + \frac{\hbar^2}{2\,m\,r_o^2}$$

$$= -0.9\ x\ 10^9\ x\ \frac{(1.6x10^{-19})^2}{6.31\ x\ 10^{-11}} + \frac{(1.15\ x\ 10^{-34})^2}{2(9.1x10^{-31}).(6.31x10^{-11})^2}$$

$$= -17.7\ eV$$

ولقد توصل العالم النمساوى اروين شرودنجر (Erwin Schrödinger) فى عام ١٩٢٤ لتلك المعادلة المناسبة والتى تُعرف منذ ذلك الحين باسم " معادلة شرودنجر " (Schrödinger equation) ويمكن استنباطها بطريقة مبسطة فيما يلى :

فى الباب الاول ذكرنا أن اى جسيم متحرك يلازمه حزمة موجيه تتصف بالسعة المتغيره (انظر صفحة) والتى تعرف فى علم ميكانيكا الكم بما يسمى دالة الموجه (Wave Function) أو دالة الحالة (State Function) .
ويمكننا التعبير عنها بالصورة التالية :

$$\psi = A\, e^{-i(\omega t - kx)} \qquad (2.4)$$

فاذا ما أجرينا على تلك الدالة التفاضل الجزئى بالنسبة لاحداثى الزمن ($\frac{\partial}{\partial t}$) نحصل على :

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\omega A\, e^{-i(\omega t - kx)}$$
$$= -i\omega\psi \qquad (2.5)$$

وبضرب كل من طرفى تلك المعادلة فى المعامل $i\hbar$ نحصل على :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = i\hbar(-i\omega\psi) = \hbar\omega\psi = E\psi$$

أى أن :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \qquad (2.6)$$

وتُفهم هذه العلاقة بانه اذا أجرينا فى المعمل تجربة لقياس الطاقة الكلية E للجسيم الذى تعبر ψ عن حركته الموجيه فان ذلك يقابل رياضيا التأثير على تلك الدالة الموجيه بالمؤثر $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$.

ومعادلة (2.6) هى احد الامثلة لما هو معروف باسم معادلة القيم الخاصة (Eigenvalue equation) وفيها يسمى ($i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$) بالعاملة (Operator)

التى تؤثر على دالة الحالة ψ ونتيجة هذا التاثير نحصل على القيمة الخاصة (Eigenvalue) للمتغير الديناميكى (Dynamical Variable) الذى يقابل تلك العاملة وهو فى هذه الحالة الطاقة الكلية E للجسيم • بينما تسمى الدالة ψ المضروبه فى تلك القيمة الخاصة باسم الدالة الخاصة (Eigen function) •

وبالمثل اذا ما أجرينا على نفس الدالة ψ التفاضل الجزئى بالنسبة لاحداثى الوضع (وهو فى هذه الحالة الاحداثى السينى x) نحصل على :

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi = + i k A e^{-i(\omega t - kx)} = + i k \psi$$

وضرب كل من طرفى هذه المعادلة فى $(-i\hbar)$ نحصل على :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi = + \hbar k \psi = p_x \psi$$

أى ان

$$-i h \frac{\partial}{\partial x}\psi = p_x \psi \qquad (2.7)$$

لاحداثيات

وبالمثل فى الحالة العامة التى فيها ψ دالة لاحداثيات الوضع z و y و x بجانب احداثى الزمن t اى ان $\psi = \psi(x, y, z, t)$ نحصل بالمثل على نتيجتين مشابهتين لمعادلة (2.7) وهما :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\psi = p_y \psi \qquad (2.8)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}\psi = p_z \psi \qquad (2.9)$$

وحيث ان الطاقة الكلية E لاى جسيم يتحرك حركة انتقالية هى

$$\frac{p^2}{2m} + V(x, y, z) = E \qquad (2.10)$$

حيث $\frac{p^2}{2m}$ هى طاقة حركته الانتقالية

، $V(x,y,z)$ هى طاقة الوضع لهذا الجسيم •

وبادخال ψ في طرفي تلك المعادلة والتعبير عن الطاقة E ، p^2 بمــــا يقابلها حيث $\vec{p}\cdot\vec{p} = p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ من عاملات نحصل على :

$$\frac{1}{2m}\left[(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^2 + (-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})^2 + (-i\hbar\frac{\partial}{\partial z})^2 \right]\psi$$

$$+ V(x, y, z)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (2.11)$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi + V(x,y,z)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (2.12.a)$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x,y,z)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (2.12.b)$$

$$\therefore \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)\right]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (2.13)$$

حيث عاملة اللابلا سيان (The Laplacian Operator) هي :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (2.14)$$

والمعادلة (2.13) هي الصورة العامة لمعادلة شرودنجر التي تعبر عن الحركــــة الموجيه للجسيم . واذا افترضنا ان الجسيم يتحرك تحت تاثير مجال محافـــــــظ (Conservative Field) فان القوة F المؤثرة عليه تعطى بالعلاقة

$$\vec{F} = -\text{grad } V = -\vec{\nabla} V \qquad (2.15)$$

حيث V كما اشرنا من قبل هي طاقة الوضع .

واذا افترضنا ان حركة الجسيم الانتقالية تحدث في بعد واحد وليكن الاتجاه السيني x فان معادلة شرودنجر تصبح على الصورة المبسطة التالية :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \qquad (2.16)$$

ونود ان نشير الى ان معادلة شرودنجر الموجيه تتميز بما يلى :

١ ـ انها معادلة خطية (Linear Equation) وهذا ضرورى من الناحيـــة الفيزيائية حيث تسمح بتراكب حلولها المختلفة لتفسير ظواهر التداخل (مثـال ذلك تجربة حيود الالكترونات) وتكون الحزمة الموجيه • كما اشرنا فى البـاب الاول •

٢ ـ انها لاتحتوى معاملاتها على متغيرات ديناميكية مثل مركبات كمية الحركة الخطيـة او الطاقة الكلية للجسيم ولكنها تحتوى على ثوابت مثل كتلة الجسيم او ثابـت ديراك العالمى $\hbar$ • وهذا ايضا يجعلها تسمح بتراكب حلولها المرتبطـة بالقيم الذاتية المختلفة لتلك المتغيرات الديناميكية •

وفى الحالة الخاصة التى يكون فيها الطاقة الكلية للجسيم لاتعتمد على الزمـن فان معادلة شرودنجر تكتب على الصورة الاتية :

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (2.17)$$

حيث تسمى ψ هنا بدالة الحالة المستقرة (Stationary Wave Function) او الحالة المستقرة (Stationary State) •

وعموما تتميز دالة الحالة ψ بالخصائص التالية :

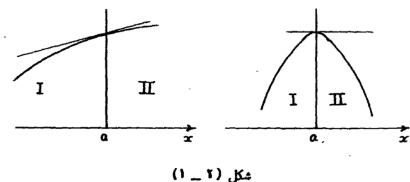
١ ـ يمكن ان تتداخل مع نفسها وذلك لتفسير نتائج تجارب حيود الجسيمات مثـل الالكترونات والنيوترونات ••• الخ •

٢ ـ تعبر عن احتمال تواجد الجسيم المرتبطه به بمعنى انها تكون كبيرة القيمة عنـد النقط التى يكون احتمال تواجد الجسيم فيها كبير ولذلك تسمى ψ سعـة الاحتمال (Probability Amplitude) • وعندما تكون قيمة ψ صفرا عنـد نقطة ما فان هذا معناه عدم تواجد الجسيم عند تلك النقطة •

٣ ـ تاخذ قيمة مفردة (Single Valued) لكل نقطة في الحيز الذى تتحـرك فيه وفي بعض الاحيان تكون تلك القيمة تساوى صفرا •

٤ ـ يستحيل ان تصل قيمتها عند نقطة ما الى مالانهاية بمعنى انها تاخذ نقط قيما محددة (Finite) ويجب ان تصل هذه القيمة الى الصفر عندما تكـون تلك النقطة في مالانهاية • ويُعبّر عن هذه الخاصية بان ψ حسنـه السلوك (Well Behaved) •

٥ ـ تتصف كل من الدالة ψ وانحدارها $grad\ \psi$ بالاستمراريـة (Continuity) في كل الحيز المُتاح لحركة الجسيم مهما تعددت الفواصل الحديـه فيه (انظر الشكل)



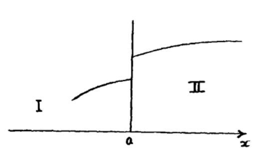
شكل (٢ ـ ١)

توضيح استمرارية الدالة ψ وانحدارها $grad\ \psi$ بمعنى

$$(grad\ \psi_{I})_{x=a} = (grad\ \psi_{II})_{x=a}\ ,\ (\psi_{I})_{x=a} = (\psi_{II})_{x=a}$$

وتوضيح عدم الاستمرارية وهذه غير مسموح بها في ميكانيكا الكم اذ ان ذلك يعنـى انه عند الفاصل الحدى $x=a$: انظر شكل (٢ـ٢) في صفحة (٣٦) •

$$grad\ \psi_{I} \neq grad\ \psi_{II}\ ,\quad \psi_{I} \neq \psi_{II}$$



شكل (٢_٢) توضيح عدم الاستمرارية وهذه غير مسموح بها فى ميكانيكا الكم اذ أن ذلك يعنى انه عند الفاصل الحدى $x = a$:

$$\text{gred}_{\,I} \neq \text{gred}_{\,II} \quad , \quad {}_{I} = {}_{II}$$

وهذا لايتفق مع المعنى الفيزيائى لدالة الحالة وانحدارها •

٦ ـ يُعبّر مربع القيمة المطلقة $|\psi|^2$ للدالة عما يسمى بكثافـــة الاحتمــــــال $P(x,y,z;t)$ (Probability Density) وهى احتمال تواجد الجسيم فى وحدة الحجوم من الحيز المُتاح • وعلى ذلك يُعطَى $P(x,y,z;t)\ dx\ dy\ dz$ "احتمال التواجد للجسيم فى عنصر الحجم $dx\ dy\ dz$ حول النقطـــــة (x, y, z) عند اللحظة t" بالعلاقة الاتية :

$$P(x,y,z;t)\ dx\ dy\ dz = |\psi\ (x,y,z;t)|^2\ dx\ dy\ dz \qquad (2.17)$$

وحيث انه من المؤكد تواجد الجسيم فى منطقة ما داخل الحيز المتاح لذا فـــان مجموع احتمالات تواجده داخل هذا الحيز المتاح يجب ان يساوى الوحـــــدة أى أن :

$$\int\limits_{\text{الحيز المتاح}} P(x,y,z;t)\ dx\ dy\ dz = \int\limits_{\text{الحيز المتاح}} |\psi|^2\ dx\ dy\ dz = 1 \qquad (2.18)$$

٧ ـ يمكن التأثير على الدالة ψ بمعاملة خطية ما (Linear Operator)

تقابل متغير ديناميكي معين وهذا يعبر عنه بمعادلة القيم الخاصة على الصورة التالية :

$$\hat{\alpha} \psi_n = \alpha_n \psi_n \qquad (2.19)$$

حيث n هو مايعرف بعدد الكم (Quantum Number) وتسمى القيم α_n لهذا المتغير الديناميكي باسم القيم الخاصة وتكوّن مجموعها طيفا من هذه القيم (Eigenvalue Spectrum) يكون في العادة غير متصل يميزها مايسمى باعداد الكم ويقابل كل قيمة من هذا الطيف دالة خاصة بها ψ_n وتتميز بنفس عدد الكم n . وتكوّن الدوال ψ_n مجموعة كاملة اعتيادية متعامدة (Orthonormal Complete Set) اذا حققت العلاقة التالية :

$$\int \psi_n^* \psi_{n'} \, dx\, dy\, dz = \delta_{nn'} \qquad (2.20)$$

$$= 1 \qquad \text{if } n = n'$$

$$= 0 \qquad \text{if } n \neq n'$$

حيث $\delta_{nn'}$ يسمى دِلْتا كُرونِكَر (Kronecker Delta) . وعندما يساوى الوحدة في حالة $n = n'$ فان الدوال ψ_n تكوّن مجموعة كاملة اعتيادية (Normalized Complete Set) اما اذا كانت $\delta_{nn'}$ تساوى صفرا (في حالة $n = n'$) فان الدوال ψ_n تكوّن مجموعة كاملة متعامدة (Orthogonal Complete Set) .

٨ — يمكن التأثير عليها باكثر من عاملة خطية على التتابع بمعنى انه اذا اثرنا على ψ بعاملة خطية $\hat{\alpha}$ ثم أثرنا على الناتج بعاملة خطية $\hat{\beta}$ فان الناتج يعطى بالعلاقة التالية :

$$\hat{\beta}\hat{\alpha}\psi = \hat{\beta}(\hat{\alpha}\psi) \qquad (2.21)$$

ويسمى بالمعاملات الخطية (Linear Operators) تلك التي تحقق العلاقات التالية :

$$\text{(i)} \quad \hat{\beta}(a\psi) = a\,\hat{\beta}\psi \tag{2.22}$$

$$\text{(ii)} \quad \hat{\alpha}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1\hat{\alpha}\psi_1 + a_2\,\hat{\alpha}\,\psi_2 \tag{2.23}$$

حيث a ، a_1 ، a_2 ثوابت .

٩ ـ تحقق الدوال ψ_n مبدأ التراكب (Superposition Principle) وتبعا له فانه اذا كانت ψ_1 ، ψ_2 هما دالتان تعبران عن جسيم ما في حالتين كميتين مختلفتين فان اي تراكب خطي (Linear Superposition) لهما $(C_1\psi_1 + C_2\psi_2)$ يعطي دالة حالة ψ تكون مقياسا لاحتمال تواجد الجسيم إما في الحالة الكمية الاولى باحتمال $|C_1|^2$ أو التواجد في الحالة الكمية الثانية باحتمال $|C_2|^2$ وهذا يتضح كما يلي :

نفرض ان

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$$

فان احتمال التواجد في الحالة الكمية الاولى او في الحالة الكمية الثانية يعطى تبعا لمعادلة (2.17) على الصورة :

$$\begin{aligned}
\int \psi^*\psi \, d\tau &= \int (C_1\psi_1 + C_2\psi_2)^* \; (C_1\psi_1 + C_2\psi_2)\, d\tau \\
&= (C_1^*\psi_1^* + C_2^*\psi_2^*) \;\; (C_1\psi_1 + C_2\psi_2)\, d\tau \\
&= |C_1|^2 \int \psi_1^*\psi_1 \, d\tau + |C_2|^2 \int \psi_2^*\psi_1 \, d\tau \\
&\quad + C_1^*\, C_2 \int \psi_1\psi_2 \, d\tau \; + C_2^*\, C_1 \int \psi_2^*\, \psi_1 \, d\tau \\
&= |C_1|^2 + |C_2|^2 + 0 + 0 \\
&= |C_1|^2 + |C_2|^2
\end{aligned}$$

وبما أن

$$\int \psi^* \psi \, d\tau = 1$$

اذن

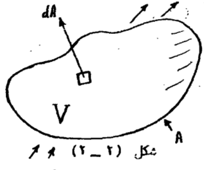
$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

حيث $|C_1|^2$ يمثل كما سبق ان ذكرنا احتمال التواجد في الحالة الكمية الاولى ، $|C_2|^2$ يمثل احتمال التواجد في الحالة الكمية الثانية .

١٠ـ الدالة ψ التي تصف نظاما يتكون من مجموعة من الجسيمات كل منها يتحدد موضعه تماما باحداثيات مستقلة عن احداثيات موضع اى جسيم آخر يمكن التعبير عنها على صورة حاصل ضرب الدوال الخاصة بكل جسيم على حدة أى ان :

$$\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2; \dots) = \psi(x_1, y_1, z_1)\, \psi(x_2, y_2, z_2) \dots \psi(x_i, y_i, z_i) \quad (2.24)$$

متجه كثافة تيار الاحتمال Probability Current Density Vector



شكل (٢ ـ ٢)
حيز حجمه V محدد بسطح A

علمنا ان مربع الدالة الموجيه $|\psi|^2$ الصاحبة للجسيم تعطى احتمال التواجد في وحدة الحجوم عند نقطة معينة ولحظة معينة . لذلك فان الاحتمال P ان نجد الجسيم في الحيز من الفراغ الذى حجمه V والمحدد بسطح مساحته A يعطى بالعلاقة :

$$P = \int \psi^* \psi \, dV \quad (2.25)$$

حيث dV عنصر الحجم – ($d\tau \equiv dV$).

ولكى نحصل على معدل تغير احتمال تواجد الجسيم مع الزمن داخل الحيز V نفاضل طرفى المعادلة (2.25) بالنسبة للزمن كما يلى :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \psi \, dV \tag{2.26}$$

$$\therefore \frac{dP}{dt} = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dV \tag{2.26'}$$

ولكن باستخدام معادلة شرودنجر والمرافقة المركبة (Complex conjugate) لها يمكن اثبات أن :

$$\left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \frac{i \hbar}{2 m} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right) \tag{2.27}$$

بالكيفية الاتية :

معادلة شرودنجر (2.16) يمكن كتابتها على الصورة

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar}{2 \, im} \nabla^2 \psi + \frac{1}{i \hbar} V(r) \psi \tag{a}$$

∴ المرافقه المركبه لها تكتب على الصورة :

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = + \frac{\hbar}{2 \, im} \nabla^2 \psi^* - \frac{1}{i \hbar} V(r) \psi^* \tag{b}$$

وبضرب المعادلة (a) فى ψ^* والمعادلة (b) فى ψ نحصل على

$$\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar}{2 \, im} \psi^* \nabla \psi + \frac{1}{i \hbar} \psi^* V(r) \psi \tag{c}$$

$$\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = + \frac{\hbar}{2 \, im} \psi \nabla^2 \psi^* - \frac{1}{i \hbar} \psi^* V(r) \psi \tag{d}$$

بجمع المعادلتين (c) ، (d) نحصل على :

$$\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{\hbar}{2 \, im} \left(\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi \right)$$

$$\therefore \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{i\,h}{2\,m} \left(\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi \right)$$

$$\therefore \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{i\,h}{2\,m} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right) \qquad (2.28)$$

وبالتعويض من (2.28) في (2.26) نحصل على :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i\,\hbar}{2\,m} \int_V \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right) dV \qquad (2.29)$$

ولكن التكامل الحجمي في الطرف الايمن يمكن تحويله الى تكامل سطحي وذلك باستخدام نظرية جرين (Green's Theorem) فنحصل على :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i\,\hbar}{2\,m} \int_A \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \cdot dA \qquad (2.30)$$

ويمكن كتابة المعادلة (2.30) على الصورة :

$$\frac{dP}{dt} = -\int \vec{S} \cdot \vec{dA} \qquad (2.31)$$

حيث المتجه $\vec{S}$ يُعرّف كالاتي :

$$\vec{S} = -\frac{i\,\hbar}{2\,m} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \qquad (2.32)$$

وباستخدام نظرية الانتشار لجاوس (Gauss's Divergence Theorem) يمكن تحويل التكامل السطحي في المعادلة (2.31) الى تكامل حجمي فنحصل على :

$$\frac{dP}{dt} = -\int_V \operatorname{div} S \, dV \qquad (2.33)$$

وبالتعويض عن $\frac{dP}{dt}$ من معادلة (2.26) نحصل على :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \psi \right) dV = -\int_V \operatorname{div} S \, dV \qquad (2.34)$$

وحيث ان الحيز V اختياري (Arbitrary) فان المعادلة (2.34) تكون صحيحه اذا كان قلب التكامل (Integrand) في طرفي المعادلة متساويين فنحصل على :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\text{div } S \tag{2.35}$$

$$\therefore \quad \text{div } S = -\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) \tag{2.36}$$

وبمقارنة هذه المعادلة بمعادلة الاستمرارية (Continuity Equation) في الفيزياء الكلاسيكية وليكن في مجال علم الكهربية والتي تكتب على الصورة :

$$\text{div } j = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \tag{2.37}$$

نجد ان المتجه $\vec{S}$ يقابل متجه كثافة التيار ولذلك يسمى المتجه $\vec{S}$ بمتجه كثافة تيار الاحتمال • وكثافة الشحنة ρ لوحدة الحجوم تقابل كثافة الاحتمال لوحدة الحجوم $(\psi^*\psi)$ • لذلك فالمعادلة (2.36) يمكن تفسيرها فيزيائيا على اساس ان معدل النقص في كثافة الاحتمال لوحدة الحجوم $(-\partial(\psi^*\psi)/\partial t)$ يساوى مقدار ماينساب في وحدة الزمن من احتمال التواجد خلال اسطح وحدة الحجوم (div S) • حيث كثافة تيار الاحتمال هي :

$$\vec{S} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{2.32}$$

مثال (2.1) :

اوجد القيم الممكن قياسها لكمية الحركة الخطية لجسيم ما ، علما بأنه في مكان ما على المحور السيني بين النقطتين المحددتين :

$$x = a \;, \quad x = b$$

الحل :

ان العاملة Ω لكمية الحركة الخطية هي : $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

وعلى هذا تصبح المعادلة :

$$\Omega\, \psi_\lambda = \Omega_\lambda\, \psi_\lambda$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_\lambda = \Omega_\lambda\, \psi_\lambda$$

وهى معادلة تفاضلية من الرتبة الاولى • ومن الواضح انه يمكن تحقيقها اذا فرضنا ان ψ_λ دالة للمتغير x فقط • فيصبح الحل لهذه المعادلة هو :

$$\therefore \int \frac{d\psi_\lambda}{\psi_\lambda} = \int \frac{i\,\Omega_\lambda}{\hbar}\, dx$$

$$\therefore \ln \psi_\lambda = \frac{i\,\Omega_\lambda}{\hbar}\, x + \ln C$$

حيث $\ln C$ ثابت التكامل

$$\therefore \frac{\psi_\lambda}{C} = e^{\frac{i}{\hbar}\Omega_\lambda x}$$

$$\therefore \psi_\lambda = C\, e^{\frac{i\,\Omega_\lambda}{\hbar} x}$$

ونلاحظ ان هذا الحل وحيد القيمة • علاوة على ذلك فان :

$$\int \psi^* \psi\, dx = (b - a)\, C^* C$$

وهذه كمية محدودة لكل قيمة محدودة للثابت C • اذا ليست هناك اية قيود على Ω_λ فيمكننا عند القياس الحصول على كل قيم الحركة الخطية • اى ان القيم الذاتية لكمية الحركة الخطية تكون طيفا متصلا •

مثـــال (٢ ـ ٢) :

على اعتبار ان لجسيم ما حر الحركة وتتحدد حالته بالدالة الموجية التاليـــــة (عند الزمن t = صفر) :

$$\psi(x,0) = A\, e^{-\left(\frac{x^2}{a^2} - ik_o x\right)}$$

اوجد قيمة المعامل A بدلالة الثابت a .

الحـــــل :

يتم تحديد قيمة المعامل A عن طريق تحقيق شرط المعايرة التالى :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \psi(x,o) \right|^2 dx = 1$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \left| \psi(x,o) \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \left(e^{-\frac{x^2}{a^2} + ik_o x}\right)\left(e^{-\frac{x^2}{a^2} - ik_o x}\right) dx$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = |A|^2 \cdot a\sqrt{\pi} = 1$$

$$\therefore |A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}$$

مثـــال (٢ ـ ٣) :

اشرح المقصود بتحويل فورير للدالة (x)

الحـــــل :

لنفترض دالة ما $f(x)$ تتميز بانها تُعيد نفسها دوريا كلما تغير الاحداثى x

بمقدار L فان هذا معناه ان :

$$f(x + L) = f(x) \qquad (1)$$

فمثلا الدالة e^{ikx} حيث $k = \frac{2\pi}{L}$
تتميز بهذه الصفة لأن :

$$e^{ik(x+L)} = e^{ikx} \cdot e^{ikL} = e^{ikx} \cdot e^{i \cdot 2\pi} = e^{ikx}$$

لأن $e^{i \cdot 2\pi} = 1$

وعلى ذلك يمكن باختيار شروط معينة مناسبة التعبير عن اى دالة $\psi(x)$ بدلالـة e^{inkx} حيث n عدد صحيح بالصورة التالية :

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{inkx} \qquad (2)$$

ويمكن بسهولة تعيين اى من المعاملات a_n وليكن a_m وذلك بضرب كل من طرفى المعادلة (2) فى e^{-imkx} ثم اجراء التكامل على مدى دورة كاملة من الاحداثى x اى من $(-L/2)$ الى $(+L/2)$ ، اى ان :

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi(x)\, e^{-imkx}\, dx = \int_{-L/2}^{L/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n\, e^{i(n-m)kx}\, dx \qquad (3)$$

وحيث ان

$$\int_{-L/2}^{L/2} e^{i(n-m)kx}\, dx = 0$$

اذا كان العدد الصحيح n لايساوى m بينما يساوى واحد صحيح عندمـا n يساوى m فهذا يؤدى الى تلاشى جميع الحدود فى (3) ماعدا الحـــــد التالـى :

$$a_m = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \psi(x)\, e^{-imkx}\, dx \qquad (4)$$

وهذه المعادلة هى التعبير الرياضى لما يقصد بتحويل فُورْير للدالة المعطاه $\psi(x)$.

مثـــال (٢ ـ ٤) :

على اعتبار حزمة موجية معايرة مربعة الشكل (عند $t = 0$) ومُعَرفة كالتالى :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}}\, e^{i\frac{p_o x}{\hbar}} \qquad |x| \leq L$$

$$= 0 \qquad |x| > L$$

احسب تحويل فُورْيَر لـ $\psi(x)$ واشرح النتيجة فيزيائيا .

الحـــل :

فى هذه الحالة نعبر عن تحويل فورير كما يلى

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)}\, dt$$

$$\therefore \quad a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,o)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}\cdot\sqrt{2L}} \int_{-L}^{+L} e^{\frac{i}{\hbar}(p_o-p)x}\, dx$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{\pi L}}\; \frac{\sin\frac{(p_o-p)L}{\hbar}}{p_o-p}$$

مثـــال (٢ ـ ٥) :

برهن على ان الدالتين الداتيتين ϕ_m ، ϕ_n التاليتين لقيمتيــــــــن ذاتيتين مختلفتين ϵ_n ، ϵ_m للعاملة الهيرميتيه H دائما متعامدتين ·

الحـــــل :

الدالة ϕ_m تحقق العلاقة :

$$H\phi_m = \epsilon_m \phi_m \qquad (1)$$

اذا ضربنا تلك المعادلة من ناحية الشمال فى ϕ_n^* ونُجرى التكامل نحصل على

$$\int \phi_n^* H \phi_m \, dV = \epsilon_m \int \phi_n^* \phi_m \, dV \qquad (2)$$

ومن الضرورى ان تحقق الدالة ϕ_n المرافقة المركبة لمعادلة (١) اى المعادلة :

$$H^* \phi_n^* = \epsilon_n \phi_n^* \qquad (3)$$

ويجب ان نتذكر هنا ان ϵ_n هى حقيقية وبضرب معادلة (3) من ناحية اليسار فى ϕ_m واجراء التكامل نحصل على النتيجة

$$\int \phi_m H \phi_n^* \, dV = \epsilon_n \int \phi_n^* \phi_m \, dV \qquad (4)$$

ومرة اخرى الطرف الايسر لمعادلة (2) مساويا للطرف الايسر لمعادلـــــة (4) لان العاملة هرميتيه وعليه فاننا بطرح المعادلتين نحصل على :

$$(\epsilon_m - \epsilon_n) \int \phi_n^* \phi_m \, dV = 0 \qquad (5)$$

ولكننا من الاساس مُفترضين ان القيمتين الذاتيتين ϵ_n ، ϵ_m مختلفتين اى ان : $(\epsilon_m - \epsilon_n)$ لايساوى صفرا · اذاً :

$$\int \phi_n^* \phi_m \, dV = 0 \qquad (6)$$

اى ان الدالتين الذاتيتين ϕ_n ، ϕ_m هما متعامدتان لبعضهما ·

مثـــال (٢ ـ ٦) :

عاير دالة كمية التحرك الموجية التالية

$$a(\vec{p}) = N \exp\left[-\frac{\alpha}{\hbar}\ |p|\right]$$

ثم وضح ان الدالة الموجية المقابلة $\psi(\vec{r})$ عند $t = 0$ هى تُعطى بالصورة

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\pi}\ (2\alpha)^{3/2}\ \frac{\alpha}{(r^2 + \alpha^2)^2}$$

الحـــل :

فى هذه المسألة من المناسب استخدام الاحداثيات الكريه وعلى ذلك فان شـرط المعايرة يعطينا :

$$1 = \iiint |a(\vec{p})|^2\ p^2\, dp\, \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{\infty} p^2 |N|^2 \exp\left[-\frac{2\alpha p}{\hbar}\right] dp$$

$$= |N|^2 \cdot 4\pi \cdot \frac{2}{(\frac{2\alpha}{\hbar})^3}$$

$$\therefore\ a(p) = \left[\frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3}\right]^{1/2} \exp\left[-\frac{\alpha}{\hbar}|p|\right]$$

$$\therefore\ \psi(r,o) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^3 \iiint p^2 dp\, \sin\theta\, d\theta\, d\phi\ a(p)\ \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\ \vec{p}\cdot\vec{r}\right]$$

واذا اخترنا المركبة p_z فى اتجاه $\vec{r}$ اذاً $\vec{p}\cdot\vec{r} = p\ r\ \cos\theta$

$$\therefore \psi(\vec{r},o) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} dp\ p^2 \exp\left[-\frac{\alpha p}{\hbar}\right] \left(\frac{3}{\pi \hbar^3}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\int_0^{\pi} \exp\left[-i\ p\ r\ \cos\theta/\hbar\right] \sin\theta\ d\theta$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot 2\pi \cdot \left(\frac{\alpha^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} dp\ p^2 \exp\left[-\frac{\alpha p}{\hbar}\right]$$

$$\cdot \frac{2\hbar}{p\,r} \sin\frac{pr}{\hbar}$$

$$= \frac{1}{\pi} (2\alpha)^{3/2} \frac{\alpha}{(\alpha^2 + r^2)^2}$$

مثـــال (٢ ـ ٧) :

مبتدئاً بمعادلة شرودنجر في بعد واحد وضح ان $\frac{d\psi}{dx}$ دائما تتصـــف بأنها متصلة مادامت دالة الجهد $V(x)$ لها قيمة محددة سواء تلك القيمة متصـــله او غير متصلة .

الحـــل :

$$\because \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi$$

اذاً باجراء التكامل على معادلة شرودنجر في صورتها هذه بيـــن $x = x_o - \epsilon$ الى $x = x_o + \epsilon$ نحصل على :

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_o+\epsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_o-\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_o-\epsilon}^{x_o+\epsilon} \left[E - V(x)\right] \psi\, dx$$

والطرف الايمن لهذه المعادلة يؤول دائما للصفر عندما تقرب ϵ من الصفر مادامت دالة الجهد لها قيمة محددة • وهذا يعنى ان الطرف الايسر يساوى صفرا ايضا وبالتالى فان $\frac{d\psi}{dx}$ تتصف بانها متصلة •

الباب الثالث

المعاملات الخطية في ميكانيكا الكم
Linear Operators in Quantum Mechanics

الباب الثالث

العاملات الخطية في ميكانيكا الكم
Linear Operators in Quantum Mechanics

سبق الاشارة الى انه في ميكانيكا الكم يقابل كل كمية فيزيائية Ω عاملـــه خطية $\hat{\Omega}$ واذا أثرت على دالة الحالة المرتبطة بجسيم ما فان ذلك يقابل اجراء تجربة في المعمل لقياس الكمية الفيزيائية (المتغير الديناميكي) الذي تعبر تلك العاملة عنه.

واذا أجرينا مثل هذه التجربة عدة مرات على نفس الجسيم فاننا نحصل على طيف من القيم لتلك الكمية الفيزيائية ويسمى المتوسط الاحصائي (The Statistical Mean or the Average) لتلك القيم بالقيمة المتوقعة (Expectation Value) لهذه الكمية الفيزيائية وعادة تكتب على الصورة $\langle \Omega \rangle$ والتي يعبر عنها بالعلاقة الاتية :

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{\Omega} \psi \, d\tau}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, d\tau} \qquad (3.1)$$

وعلى فرض أن :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, d\tau = 1$$

$$\therefore \langle \Omega \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{\Omega} \psi) \, d\tau \qquad (3.2)$$

وفيما يلي سنورد بعض الامثلة للعاملات الخطية والتي كثيرا ماتقابلنا في ميكانيكا الكم بالاضافة لتلك التي سبق ذكرها في الباب السابق والقواعد التي تتبعها :

مثال (٣ـ١) : العاملة الخطية التى تقابل الازاحة الانتقالية اى عاملة الانتقال (Translation Operator $\hat{T}$) :

من المعنى الخاص بتلك العاملة فــان :

$$\hat{T}\ \psi(x) = \psi(x + a) \qquad (3.3)$$

حيث a هى المسافة التى أزيح بها الجسيم عن موضعه الاصلى x ٠ فــــاذا عبّرنا عن $\psi(x + a)$ على صورة المتسلسلة الاسية التالية :

$$\psi(x+a) = \psi(x) + a\frac{\partial}{\partial x}\ \psi(x) + \frac{a^2}{2!}\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\ \psi(x) + \ldots$$

أى أن :

$$\psi(x+a) = \sum \frac{1}{n!} a^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}\ \psi(x) \qquad (3.4)$$

ولكن من المعلوم أن :

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \ldots$$

$$= \sum \frac{1}{n!} x^n \qquad (3.5)$$

وبمقارنة المعادلتين (3.4) ، (3.5) نجد ان عاملة الانتقال عبارة عن :

$$\hat{T} = e^{a\frac{\partial}{\partial x}} \qquad (3.6)$$

وبوجه عام تُكتب على الصورة

$$\hat{T} = e^{a_i\frac{\partial}{\partial x_i}} \qquad (3.6')$$

مثال (٣ـ٢) : العاملة الخطية التى تقابل الازاحة الدورانية اى عاملة الـــــدوران $\hat{R}$:(Rotation Operator)

من المعنى الخاص بتلك العاملة فان :

$$\hat{R}\ \psi(\phi) = \psi(\phi + \alpha) \qquad (3.7)$$

حيث α هى الازاحة الزاوية للجسيم عن موضعه الاصلى تحت تأثير تلك العاملة .
وبالمثل نُعبر عن $\psi(\phi + \alpha)$ على الصورة التالية :

$$\psi(\phi + \alpha) = \psi(\phi) + \alpha \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\phi) + \frac{\alpha^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(\phi) + \ldots \tag{3.8}$$

$$\psi(\phi + \alpha) = \sum \frac{1}{n!} \alpha^n \frac{\partial^n}{\partial \phi^n} \psi(\phi) \tag{3.9}$$

$$\psi(\phi + \alpha) = \sum \frac{1}{n!} \left(\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}\right)^n (\phi) \tag{3.10}$$

وبمقارنة المعادلتين (3.4) ، (3.10) نجد ان عاملة الازاحة الدورانيـــة عبارة عن :

$$\hat{R} = e^{\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}} \tag{3.11}$$

<u>قواعد التبادل للعاملات الخطية :</u>

(Commutation Rules of Linear Operators)

سبق ان ذكرنا انه اذا أثرنا على دالة ψ بعاملة خطية $\hat{\alpha}$ ثم اثرنـــا على الناتج $(\hat{\alpha}\psi)$ بعاملة خطية اخرى $\hat{\beta}$ فاننا نصل الى نتيجة ليست بالضـرورة مطابقة لما يقابل التأثير اولا بالعاملة $\hat{\beta}$ على الدالة ψ ثم اثرنا على النــاتـــج $\hat{\beta}\psi$ بالعاملة $\hat{\alpha}$ اى انه ليس بالضرورة ان يكون

$$\hat{\beta}(\hat{\alpha}\psi) = \hat{\alpha}(\hat{\beta}\psi) \tag{3.12}$$

ويتضح ذلك من المثال التالى :

<u>مثال (٣-٣) :</u>

اذا فرضنا ان العاملة $\hat{\alpha}$ هى العاملة $\hat{x}$
والعاملة $\hat{\beta}$ هى العاملة $\frac{\partial}{\partial x}$
فيكـــون $\hat{\alpha}\hat{\beta} = x \frac{\partial}{\partial x}$

بينما $\hat{\beta}\,\hat{\alpha} = \frac{\partial}{\partial x}\,x$

فاذا أثرنا بهما على الدالة الاختيارية $f(x)$ نحصل على :

$$(\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha})\,f(x) = \left[x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right] f(x)$$

$$= x\frac{\partial}{\partial x}f(x) - \frac{\partial}{\partial x}(xf(x))$$

$$= x\frac{\partial f(x)}{\partial x} - x\frac{\partial f(x)}{\partial x} - f(x)$$

$$= -1 \cdot f(x)$$

وحيث ان هذه النتيجة لاتعتمد على الدالة الاختيارية $f(x)$ فان

$$\left[\hat{x}\frac{\hat{\partial}}{\partial x} - \frac{\hat{\partial}}{\partial x}x\right] = -1 \qquad (3.13)$$

فى هذه الحالة يقال ان العاملتين $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$ لاتتبادلان (do not commute)

أما فى الحالة الخاصة التى يحدث فيها أن :

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha} = +1 \qquad (3.15)$$

فان $\hat{\alpha}$ ، $\hat{\beta}$ يقال انهما تتبادلان على التضاد

أقواس بواسون فى ميكانيكا الكـــم :

(Poisson's Brackets in Quantum Mechanics)

عادة يُعبر عن الكمية $\hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha}$ بالصورة الاتية $[\hat{\alpha},\hat{\beta}]$

أى أن :

$$[\hat{\alpha},\hat{\beta}] = \hat{\alpha}\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\alpha} \qquad (3.16)$$

وتسمى الاقواس [ ] بأقواس التبادل (Commutator Brackets)
او اقواس بواسون فى ميكانيكا الكم •

واذا كان المؤثران $\hat{B}$ و $\hat{A}$ يتبادلان فان :

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \qquad (3.17)$$

كما انه يمكن اثبات العلاقات الاتية لاقواس بواسون بالنسبة لمجموعة ثلاثية من العاملات الخطية $(\hat{A},\hat{B},\hat{C})$:

$$\begin{aligned}
&\text{i)} && \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\left[\hat{B}, \hat{A}\right] \\
&\text{ii)} && \left[\hat{A}, \hat{B}+\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right] \\
&\text{iii)} && \left[\hat{A}+\hat{B}, \hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{B}, \hat{C}\right] \\
&\text{iv)} && \left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] C \qquad (3.16) \\
&\text{v)} && \left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B} = -\left[\hat{C}, \hat{A}\hat{B}\right] \\
&\text{vi)} && \left[\hat{A}, \left[\hat{B}, \hat{C}\right]\right] = \left[\hat{C}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + \left[\hat{B}, \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\right] = 0
\end{aligned}$$

مثال (٤ ـ ٣) : اوجد مايساويه قوس بواسون للعاملتين (المؤثرين الديناميكيين) $\hat{\ell}_+$ ، $\hat{\ell}_-$ حيث :

$$\hat{\ell}_+ = \hat{x} + \frac{\hat{\partial}}{\partial x} \quad , \quad \hat{\ell}_- = \hat{x} - \frac{\hat{\partial}}{\partial x}$$

الحـــل :

لايجاد المطلوب فى هذه الحالة نؤثر بقوس بواسون كوحدة على اى دالة اختيارية $f(x)$ فيكون لدينا :

$$\left[\hat{\ell}_+,\ \hat{\ell}_-\right] f(x) = (\hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- - \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+)\, f(x)$$

$$= (x + \frac{\partial}{\partial x})(x - \frac{\partial}{\partial x})\, f(x) - (x - \frac{\partial}{\partial x})(x + \frac{\partial}{\partial x})\, f(x)$$

$$= (x + \frac{\partial}{\partial x})(xf(x) - \frac{\partial f(x)}{\partial x}) - (x - \frac{\partial}{\partial x})(xf(x) + \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

$$= x\,(xf(x) - \frac{\partial f(x)}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x}\,(xf(x) - \frac{\partial f(x)}{\partial x})$$

$$- x(xf(x) + \frac{\partial f(x)}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x}\,(xf(x) + \frac{\partial f(x)}{\partial x})$$

$$= x^2\, f(x) - x\frac{\partial f(x)}{\partial x} + x\frac{\partial f(x)}{\partial x} + f(x) - \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}$$

$$- x^2\, f(x) - x\frac{\partial f(x)}{\partial x} + x\frac{\partial f(x)}{\partial x} + f(x) + \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}$$

$$= 2\, f(x)$$

$$\therefore \left[\hat{\ell}_+,\ \hat{\ell}_-\right] f(x) = 2\, f(x) \qquad (3.18)$$

وحيث ان هذه النتيجة حصلنا عليها باستخدام دالة اختيارية $f(x)$ فيكون :

$$\left[\hat{\ell}_+,\ \hat{\ell}_-\right] = 2 \qquad (3.19)$$

المعاملات الخطية المقابلة لكمية الحركة الخطية :

(Linear Operators Corresponding to Angular Momentum Operators)

نعلم ان مُتجه كمية الحركة الزاوية $\vec{L}$ يعرف بالعلاقة التالية :

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P} \qquad (3.20)$$

حيث $\vec{r}$ متجه الوضع (Position Vector)

، $\vec{P}$ متجه كمية الحركة الخطية

وتبعا لهذا التعريف فانه فى الاحداثيات الكَرتيزية تأخذ المعادلة (3.20) الصـــورة التالية :

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \qquad (3.21)$$

$$\therefore \quad \vec{L} = \vec{i}\,(yp_z - zp_y) + \vec{j}(zp_x - xp_z) + \vec{k}(xp_y - yp_x)$$
$$= \vec{i}\,L_x + \vec{j}\,L_y + \vec{k}\,L_z$$

فتكون مركبات المتجه $\vec{L}$ هى :

$$L_x = (yp_z - zp_y) \qquad (3.22a)$$

$$L_y = (zp_x - xp_z) \qquad (3.22b)$$

$$L_z = (xp_y - yp_x) \qquad (3.22c)$$

وعلى ذلك نحصل على العاملات الخطية المقابلة لتلك المركبات بالتعويض عن كل مـــن المركبات (x, y, z) لمتجه الموضع $\vec{r}$ وكذلك عن المركبات (p_x, p_y, p_z) لمتجه كمية الحركة الخطية $\vec{p}$ بما يقابل كل منها من عاملة خطية :

$$x \rightarrow \hat{x},\; y \rightarrow \hat{y},\; z \rightarrow \hat{z}\;,$$
$$p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\hat{\partial}}{\partial x},\; p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\hat{\partial}}{\partial y}\;,\; p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\hat{\partial}}{\partial z} \qquad (3.23)$$

فنحصل على :

$$\hat{L}_x = -i\hbar\,(\hat{y}\frac{\hat{\partial}}{\partial z} - \hat{z}\frac{\hat{\partial}}{\partial y}) \qquad (3.24)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\,(\hat{z}\frac{\hat{\partial}}{\partial x} - \hat{x}\frac{\hat{\partial}}{\partial z}) \qquad (3.25)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\,(\hat{x}\frac{\hat{\partial}}{\partial y} - \hat{y}\frac{\hat{\partial}}{\partial x}) \qquad (3.26)$$

اذاً بوجه عام نحصل على :

$$\hat{L} = -i\hbar\,(\hat{r} \times \hat{\nabla}) \tag{3.27}$$

وينتج عن هذه العلاقات عدة خصائص هامة لتلك العاملات تتضح من الامثلة التالية :

مثال (٣ ـ ٥) : اثبت ان : $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\,\hat{L}_z$

الحـــل :

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = (\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x)$$

ولكن :

$$\hat{L}_x\hat{L}_y = (-i\hbar)^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$= -\hbar^2\left\{\left\{y\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\} - \left\{y\frac{\partial}{\partial z}\left(x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right\} - \left\{z\frac{\partial}{\partial y}\left(z\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\} + \left\{z\frac{\partial}{\partial y}\left(x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right\}\right\}$$

$$\therefore\ \hat{L}_x\hat{L}_y = -\hbar^2\left\{yz\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x} + y\frac{\partial}{\partial x} - yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial x} + zx\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}\right\} \tag{3.28}$$

وبالمثل يمكن اثبات ان :

$$\hat{L}_y\hat{L}_x = -\hbar^2\left\{zy\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial z} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + xz\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial y} + x\frac{\partial}{\partial y}\right\} \tag{3.29}$$

ومن (3.28) ، (3.29) نحصل على :

$$(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x) = -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$= i\hbar \cdot i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$= i\hbar\,(-i\hbar)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\therefore \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z \tag{3.30}$$

وبالمثل فانه يمكن اثبات ان :

$$\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar \hat{L}_x \tag{3.31}$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar \hat{L}_y \tag{3.32}$$

وهذه النتائج توضح ان مركبات كمية التحرك الزاوى لاتتبادل مع بعضها · بينما مربع متجه كمية الحركة L^2 يتصف بأنه يتبادل مع كل من تلك المركبات (L_x, L_y, L_z) ويتضح ذلك من المثال التالى :

مثال (٣ _ ٦) : اثبت ان : $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = 0$

الحل : نعلم ان $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

$$\therefore \left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = (\hat{L}^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}^2)$$

$$= \hat{L}_x^2\hat{L}_x + \hat{L}_y^2\hat{L}_x + \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_x^2 - \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_x\hat{L}_z^2$$

$$= \hat{L}_y^2\hat{L}_x + \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_x\hat{L}_z^2$$

$$= \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_x\hat{L}_y^2$$

$$+ \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_x\hat{L}_z^2$$

$$= \hat{L}_y(\hat{L}_y\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y) + (\hat{L}_y\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y)\hat{L}_y$$

$$+ \hat{L}_z(\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z) + (\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z)\hat{L}_z$$

$$= -i\hbar \hat{L}_y\hat{L}_z - i\hbar \hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y\hat{L}_z = 0$$

$$\therefore \left[\hat{L}^2, \hat{L}_x\right] = 0 \tag{3.33}$$

وبالمثل يمكن اثبات ان :

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_y\right] = 0 \qquad (3.34)$$

$$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0 \qquad (3.35)$$

وباتباع نفس الطريقة يمكن أثبات العلاقات الاتية :

$$\left[\hat{L}_z, \hat{x}\right] = i\hbar\,\hat{y} \qquad (3.36)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{y}\right] = -i\hbar\,\hat{x} \qquad (3.37)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{z}\right] = 0 \qquad (3.38)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{P}_x\right] = +i\hbar\,\hat{P}_y \qquad (3.39)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{P}_y\right] = -i\hbar\,\hat{P}_x \qquad (3.40)$$

$$\left[\hat{L}_z, \hat{P}_z\right] = 0 \qquad (3.41)$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{P}_x\right] = 0 \qquad (3.42)$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{P}_y\right] = +i\hbar\,\hat{P}_z \qquad (3.43)$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{P}_z\right] = -i\hbar\,\hat{P}_y \qquad (3.44)$$

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - h\,\hat{L}_z \qquad (3.45)$$

$$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + h\,\hat{L}_z \qquad (3.46)$$

حيث

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\,\hat{L}_y \qquad (3.47)$$

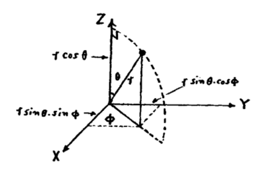
$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\,\hat{L}_y \qquad (3.48)$$

كما يمكن باستخدام العلاقة (٤) ، (٥) من المعادلة (3.17) اثبات أنْ :

$$\left[x, P^n \right] = i \hbar n p^{n-1} \tag{3.49}$$

مركبات كمية الحركة الزاوية في الاحداثيات الكريـــــه :

The Components of the Angular-Momentum Operator in Spherical Coordinates



شكل (٣ـ١) توضيح العلاقة بين الاحداثيات الكرية والاحداثيات الكرتيزية .

من المعلوم ان معادلات الاحداثيات التي تربط بين الاحداثيات الكريــــــــــه (r, θ, ϕ) والاحداثيات الكرتيزيه (x, y, z) تكتب على الصورة الاتية :

$$x = r \sin \theta \cdot \cos \phi \tag{3.50}$$

$$y = r \sin \theta \cdot \sin \phi \tag{3.51}$$

$$z = r \cos \theta \tag{3.52}$$

وهذه المعادلات تُعبر عن الاحداثيات الكرتيزية بدلالة الاحداثيات الكريه .

ولكن معادلات التحويل العكسية التى تُعبِّر عن الاحداثيات الكريه بدلالـــــة الاحداثيات الكرتيزية تكتب على الصورة :

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{3.53}$$

$$\theta = \text{arc cos } \frac{z}{r} = \text{arc cos } \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \tag{3.54}$$

$$\phi = \text{arc tan } \frac{y}{x} \tag{3.55}$$

$$r \sin \theta = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{3.56}$$

ولدينا ايضا العلاقات الهامة الاتية :

$$(\text{arc sin } V)' = + \frac{V'}{\sqrt{1 - V^2}} \tag{3.57}$$

$$(\text{arc cos } V)' = - \frac{V'}{\sqrt{1 - V^2}} \tag{3.58}$$

$$(\text{arc tan } V)' = + \frac{V'}{1 + V^2} \tag{3.59}$$

$$(\text{arc cot } V)' = - \frac{V'}{1 + V^2} \tag{3.60}$$

وباستخدام العلاقات من (3.53) الى (3.60) يمكن اثبات ان :

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \phi \tag{3.61}$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \phi \tag{3.62}$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos \theta \tag{3.63}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \tag{3.64}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \tag{3.65}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = - \frac{\sin \theta}{r} \tag{3.66}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \tag{3.67}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\cos \phi}{r \sin \phi} \tag{3.68}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \tag{3.69}$$

وكذلك يمكن استخدام العلاقات الاتية :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{3.70}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{3.71}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{3.72}$$

للحصول على النتائج الاتية :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\phi}{r \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{3.73}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin\phi \cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{3.74}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} \tag{3.75}$$

وبالتعويض من المعادلات (3.73)، (3.74) ، (3.75) في المعادلات (3.24) ، (3.25) ، (3.26) يمكن الحصول على مركبات عاملة كمية الحركة الزاوية في الاحداثيات الكرية على الصورة الاتية :

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right) \tag{3.76}$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right) \tag{3.77}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{3.78}$$

ويتضح ذلك من المثال الآتى :

مثال (٣ـ٧): اوجد المركبة L_y فى الاحداثيات الكريه

الحل :

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$= -i\hbar \left\{ r\cos\theta \left(\sin\theta\cos\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - r\sin\theta\cos\phi\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right\}$$

$$\therefore \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left\{ \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right.$$

مثال (٣ـ٨): اثبت ان :

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

حيث كما سبق ان اشرنا

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$

الاثبات : نعوض عن L_x ، L_y بما يقابلهما فى الاحداثيات الكريه فنحصل على :

$$L_+ = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$+ i(i\hbar)\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$= \hbar\left[i\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

$$= \hbar(\cos\phi + i\sin\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + \hbar\left(i\cot\theta(\cos\phi + i\sin\phi)\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$= \hbar e^{i\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} + i\hbar\cot\theta\, e^{i\phi}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\therefore \quad \hat{L}_+ = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi}\right) \qquad (3.79)$$

بالمثل يمكن اثبات ان :

$$\hat{L}_- = \hbar e^{-i\phi} \left(i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial \theta}\right) \qquad (3.80)$$

حيث كما سبق ان اشرنا :

$$\hat{L}_- = (\hat{L}_x - i \hat{L}_y)$$

مثال (٣-٩) : اثبت ان عاملة مربع كمية التحرك الزاوى الكلى بدلالة الاحداثيات الكريسة عبارة عن :

$$L^2 = -\hbar^2 \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \qquad (3.81)$$

الحل : بما ان

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

اذاً بالتعويض من المعادلات (3.76) ، (3.77) ، (3.78) نحصل على :

$$L^2 = -\hbar^2 \Big[\left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right)^2$$

$$+ \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Big]$$

$$= -\hbar^2 \Big[\sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$+ \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \cot^2 \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$+ \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$- \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta}\right)$$

$$+ \cot^2 \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi}\right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Big]$$

$$L^2 = \hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$$= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + (\cot^2\theta + 1)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$$\therefore\ L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \quad (3.81)$$

مثال (٣ـ١٠): اثبت ان العاملة ∇^2 ترتبط بالعاملة L^2 بالصورة التالية :

$$\nabla^2 = \left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{L^2}{\hbar^2\ r^2}\right\} \quad (3.82)$$

الحـل :

$$\because\ \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

اذن بالتعويض عن $\frac{\partial}{\partial x}$ ، $\frac{\partial}{\partial y}$ ، $\frac{\partial}{\partial z}$ من العلاقات (3.73) ، (3.71) ، (3.75) نحصل على :

$$\nabla^2 = (\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi})^2$$
$$+ (\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin\phi\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi})^2$$
$$+ (\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta})^2$$

وباتباع نفس خطوات الحل في المثال السابق (3.9) نجد ان :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})$$
$$+ \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} \quad (3.83)$$

ولكن من معادلة (3.81) في المثال السابق نجد ان :

$$\left\{ \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\} = -\frac{L^2}{\hbar^2} \qquad (3.84)$$

وهذا معناه ان ∇^2 ترتبط بعاملة مربع كمية الحركة الزاوية الكلية لمجموعة ما على الصورة التالية :

$$\nabla^2 = \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] \qquad (3.82)$$

ونود ان نشير الى ان هذه النتيجة (3.82) بجانب عدد من النتائج التي وصلنا اليها في هذا الباب سوف نستفيد منها عند دراستنا لمسألة ذرة الايدروجين في الباب السادس باذن الله سبحانه وتعالى •

مثـــال (٣ ــ ١١) :

اوجد مايساويه العاملة :

$$\left[i\hbar\vec{\nabla} + \vec{A}(\vec{r}) \right]^2$$

حيث كلا من $\vec{\nabla}$ ، $\vec{A}$ متجه •

الحـــل :

بجعل هذه العاملة تؤثر على دالة اختيارية ψ (كمية قياسية) نجد ان :

$$\left[i\hbar\vec{\nabla} + \vec{A} \right]^2$$

$$= \left[i\hbar\vec{\nabla} + \vec{A} \right] \times \left[i\hbar\vec{\nabla} + \vec{A} \right]\psi$$

$$= \left[i\hbar\vec{\nabla} + \vec{A} \right] \times \left[i\hbar\vec{\nabla}\psi + \vec{A}\psi \right]$$

$$= \left[i\hbar\vec{\nabla} + \vec{A} \right] \times \left[i\hbar\, \overrightarrow{\text{grad}}\,\psi + \vec{A}\psi \right]$$

$$= i\hbar\vec{\nabla}\left[i\hbar\ \vec{grad}\,\psi + \vec{A}\psi\right] + \vec{A}\left[i\hbar\ \vec{grad}\,\psi + A\psi\right]$$

$$= -\hbar^2\nabla^2\psi + i\hbar\ \vec{\nabla}\cdot\vec{A}\psi + A\vec{\nabla}\psi$$

$$+ i\hbar A\vec{\nabla}\psi + A^2\psi$$

$$= (-\hbar^2\nabla^2 + i\hbar\ \mathrm{div}\ \vec{A} + 2i\hbar\ (\vec{A}\cdot\vec{\nabla}) + A^2)\psi$$

$$\therefore\quad (i\hbar\nabla + A)^2$$

$$= -\hbar^2\nabla^2 + i\hbar\ \mathrm{div}\ \vec{A} + 2i\hbar\ (\vec{A}\cdot\vec{\nabla}) + A^2$$

مثـــال (٣ ـ ١٢) :

وضح ما اذا كانت المركبة p_x لكمية التحرك الخطى قيمتها المتوقعة حقيقيـة ام لا .

الحـــل :

من التعريف العام للقيمة المتوقعة فان :

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\,(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi\ dV\quad (dV = d^3 r)$$

وعلى اساس ان الحزمة الموجية متجهة ناحية المحور x

$$\therefore\ \langle p_x\rangle = \int\psi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi\ dx$$

$$= -i\hbar\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \left[\psi^* \psi\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx = 0 - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx = 0$$

ومعنى هذه النتيجة ان $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$ يجب ان تكون كميـــة تخيلية مطلقة وعلى ذلك

$$\therefore \langle p_x \rangle = i \hbar \times (\text{كمية تخيلية مطلقة}) = \text{كمية حقيقية}$$

مثـــال (٢ ـ ١٣) :

وضح ان :

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \left\langle - \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

حيث V دالة الجهد .

الحـــل :

بما ان :

$$\langle p_x \rangle = - i \hbar \cdot \int \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3r$$

$$\therefore \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = - i \hbar \frac{d}{dt} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3r$$

$$= - i \hbar \left[\int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3r + \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3r \right]$$

ولكن

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^*$$

$$، \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$

اذا :

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \int \psi^* \left[V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (V\psi) \right] d^3r$$

حيث تم تحويل الجزء الاخر من الطرف الايمن الى تكامل سطحي يؤول مقداره الـــــى الصفر .

$$\therefore \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = -\int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi \, d^3r = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

الباب الرابع

استخدام معادلة شرودنجر فى معالجة بعض الظواهر الفيزيائية المرتبطة بحركة جسيمات داخل حيز به حواجز جهدية

الباب الرابع

استخدام معادلة شرودنجر فى معالجة بعض الظواهر الفيزيائية المرتبطة بحركة جسيمات داخل حيز به حواجز جهدية

١ ــ حركة جسيم حـــر : The Free-Particle Motion

هى حركة جسيم داخل حيز يتميز بان طاقة الوضع V داخله تساوى صفـرا •
وفى هذه الحالة تكون الطاقة الكلية لهذا الجسيم E تساوى طاقة حركته أى أن :

$$E = \tfrac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m} \qquad (4.1)$$

وتكون العاملة الهاميلتونية عبارة عن :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \qquad (4.2)$$

وعلى ذلك تأخذ معادلة شرودنجر التى تصف تلك الحركة الحرة للجسيم الصـــــورة التالية :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r,t) \qquad (4.3)$$

وبافتراض ان دالة الحالة $\psi(r,t)$ يمكن التعبير عنها كحاصل ضرب دالتيـــــن احداهما $\phi(r)$ والاخرى $\xi(t)$ اى ان :

$$\psi(r,t) = \phi(r)\ \xi(t) \qquad (4.4)$$

اذاً بالتعويض عن (4.4) فى (4.3) نحصل على :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi(t) \nabla^2 \phi(r) = i\hbar\, \phi(r) \frac{\partial}{\partial t} (t) \qquad (4.5)$$

وبقسمة طرفى هذه المعادلة على الدالة $\psi(r,t)$ نحصل على :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi(r)} \nabla^2 \phi(r) = i\hbar \frac{1}{\xi(t)} \frac{\partial \xi(t)}{\partial t} \qquad (4.6)$$

ونلاحظ فى هذه المعادلة ان الطرف الايمن منها دالة للمتغير "t" فقط بينمـــا الطرف الايسر منها دالة للمتغير "r" فقط وحيث ان كلا منهما يساوى الاخر لجميـــع قيم t ، r فان هذا رياضيا لايتحقق الا اذا كان كل منهما يساوى مقدارا ثابتـــا مشتركا ونرمز له بالرمز W . وعلى ذلك فان معادلة (4.6) تؤدى الى المعادلتين التاليتين :

$$i \hbar \frac{d\, \xi(t)}{dt} = W\ \xi(t) \qquad (4.7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(r) = W\, \phi(r) \qquad (4.8)$$

من المعادلة (3.7) نحصل على :

$$\frac{d\, \xi(t)}{\xi(t)} = -\frac{i}{\hbar} W\, dt$$

$$\therefore \quad \xi(t) = \xi(0)\ e^{(-i/\hbar) Wt} \qquad (4.9)$$

وحيث ان الاس $(-i \cdot W \cdot t/\hbar)$ لابد وأن يكون بلا أبعاد (Dimensionless) فهذا معناه ان المقدار الثابت W له نفس ابعاد الطاقة . اى ان وحداته هـــى الجول ولذلك تسمى W معامل الطاقة (Energy Factor) . والان باعادة ترتيب المعادلة (3.8) نحصل على :

$$\nabla^2 \phi(r) + \frac{2mW}{\hbar^2} \phi(r) = 0 \qquad (4.10)$$

$$\therefore \nabla^2 \phi(r) + k^2 \phi(r) = 0 \qquad (4.11)$$

حيث $k^2 = 2mW/\hbar^2$. والحل العام للمعادلة هو الصورة التالية :

$$\phi(r) = A\ e^{\pm i\, \vec{k} \cdot \vec{r}} \qquad (4.12)$$

وهذا الحل يمثل حركة موجه مستوية (Plane-Wave Motion) تتميـــز بمتجه انتشار الموجه k (Propagation Vector) والذى يكون عموديا على صـــــدر الموجه المستوية .

وعلى ذلك فان الحل العام لمعادلة شرودنجر التى تمثل حركة الجسيم الحر هو

$$\psi(r,t) = A\, e^{\pm i(\vec{k}\cdot\vec{r})} \cdot \xi(t)$$

$$\therefore \psi(r,t) = C\, e^{i\left\{\pm k\cdot r - \frac{W}{\hbar} t\right\}} \qquad (4.13)$$

ويتضح من هذه النتيجة ان تلك الحركة تعتمد على الزمن بجانب اعتمادها علـــــى احداثيات الموضع ٠

٢ ــ حركة جسيم داخل صندوق مغلق :

(Motion of a Particle Inside a Closed Box)

فى هذه المسألة نعتبر حركة جسيم داخل حيز يكون الجهد فيه مساويا للصفـــر (اى انها تشبه حركة الجسيم الحر) ولكن هذا الحيز يتميز بانه محدد بجدران تبلـــغ قيمة الجهد عندها فجأة الى مالانهاية وهذا معناه انه من المستحيل تواجد الجسيـــم عند تلك الجدران وبالتالى عدم تواجده خارجها ايضا ٠ وهذا ماتقصد به ان الصندوق الذى يتحرك داخله الجسيم مغلق ٠ وباعتبار ان الحركة فى ثلاث ابعاد (x, y, z) فانه يمكننا التعبير عن الشروط الحدية التى تميز الجهد الذى يتعرض له هذا الجسيـــم اثناء حركته داخل الصندوق كما يلى :

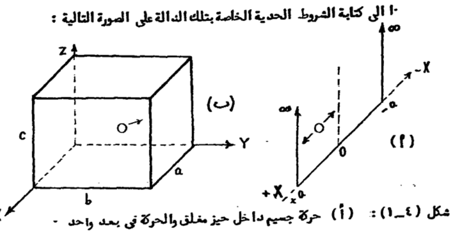
اولا : داخل الصندوق

$$V = 0 \quad \text{for} \quad |x| < a\,,\ |y| < b,\ |z| < C \qquad (4.14)$$

$$V = \infty \quad \text{for} \quad |x| \geqslant a\,,\ |y| \geqslant b,\ |z| \geqslant C \qquad (4.15)$$

وحيث ان الطاقة الكلية للجسيم لاتعتمد على الزمن حيث انه معزول عن اى مؤثـــرات خارجية لذلك فاننا نستبدل عاملة الطاقة $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ بالطاقة الكليـــة E التى تقابلها ٠ وعلى ذلك فان الدالة الموجية لاتعتمد على احداثى الزمن وهـــذا

١٠ الى كتابة الشروط الحدية الخاصة بتلك الدالة على الصورة التالية :



شكل (٤ـ١) : (أ) حركة جسيم داخل حيز مغلق والحركة فى بعد واحد .
(ب) حركة جسيم داخل حيز مغلق والحركة فى ثلاث ابعاد .

$$\psi(x, y, z) = \psi(x, y, z) \quad \text{for } |x| < a, |y| < b, |z| < c \tag{4.16}$$

$$\psi(x, y, z) = 0 \quad \text{for } |x| \geqslant a, |y| \geqslant b, |z| \geqslant c \tag{4.17}$$

وعلى ذلك فان معادلة شرودنجر التى تصف حركة الجسيم فى هذه الحالة تأخذ الصورة التالية :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z) \tag{4.18}$$

حيث

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\vec{p}\cdot\vec{p}}{2m} = \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}\right)$$

$$E = E_x + E_y + E_z \tag{4.19}$$

والان باتباع نفس الاسلوب فى فصل المتغيرات الذى سلكناه فى معالجة حركة الجسيم الحر فانه بالتعبير عن الدالة الموجية بالصورة التالية :

$$\psi(x,y,z) = X(x)\, Y(y)\, Z(z) \tag{4.20}$$

نحصل من المعادلة (4.18) على ثلاث معادلات هى :

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2} + \frac{2\,m\,E_x}{\hbar^2}X(x) = \frac{d^2X(x)}{dx^2} + k_1^2\,X(x) = 0 \qquad (4.21)$$

$$\frac{d^2Y(y)}{dy^2} + \frac{2\,m\,E_y}{\hbar^2}Y(y) = \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + k_2^2\,Y(y) = 0 \qquad (4.22)$$

$$\frac{d^2Z(z)}{dz^2} + \frac{2\,m\,E_z}{\hbar^2}Z(z) = \frac{d^2Z(z)}{dz^2} + k_3^2\,Z(z) = 0 \qquad (4.23)$$

كل منها يمثل معادلة شرودنجر لحركة الجسيم فى بعد واحد داخل الصندوق •

(Schrodinger equation for one-dimensional motion inside a box)

والحل العام لاى منها ولتكن المعادلة الاولى منها هو :

$$X(x) = A\,e^{+ik_1x} + B\,e^{-ik_1x} \qquad (4.24)$$

وبتطبيق الشرط الحدى الذى ينص على انه عند $x = -a$ تكون $X = 0$

نحصل على :

$$0 = A\,e^{-ik_1a} + B\,e^{+ik_1a}$$

$$\therefore \quad A\,e^{-ik_1a} = -B\,e^{+ik_1a}$$

$$\therefore \quad A = -B\,e^{+2ik_1a} \qquad (4.25)$$

وبتطبيق الشرط الحدى الاخر الذى ينص على انه عند $x = +a$ تكون $X=0$

نحصل على

$$0 = A\,e^{+ik_1a} + B\,e^{-ik_1a}$$

$$\therefore \quad A = -B\,e^{-2ik_1a} \qquad (4.26)$$

وبقسمة المعادلة (4.25) على المعادلة (4.26) نحصل على :

$$1 = + e^{4ik_1a} = (e^{2ik_1a})^2$$

$$\therefore \quad e^{2ik_1a} = \pm 1 \qquad (4.27)$$

ولنأخذ مثلا الاشارة الموجبة :

$$e^{2ik_1a} = +1 \qquad (4.28)$$

$$\therefore \cos 2k_1a + i \sin 2k_1a = +1$$

$$\therefore \quad 2k_1a = n_x$$

حيث $n_x = 0, 2, 4, \ldots$ اى عدد زوجى

$$\therefore \quad k_1 = \frac{n_x \cdot \pi}{2a}$$

$$\therefore \quad k_1^2 = \frac{n_x^2 \cdot \pi^2}{4a^2} = \frac{2mE_x}{\hbar^2}$$

وعليه فان طاقة الجسيم المرتبطة بحركته فى اتجاه الاحداثى x تُعطى بالعلاقة

$$E_x = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \cdot n_x^2 \qquad (4.29)$$

مع استبعاد القيمة $n_x = 0$

وبالتعويض من المعادلة (4.28) فى المعادلة (4.25) نجد أن :

$$A = -B \qquad (4.30)$$

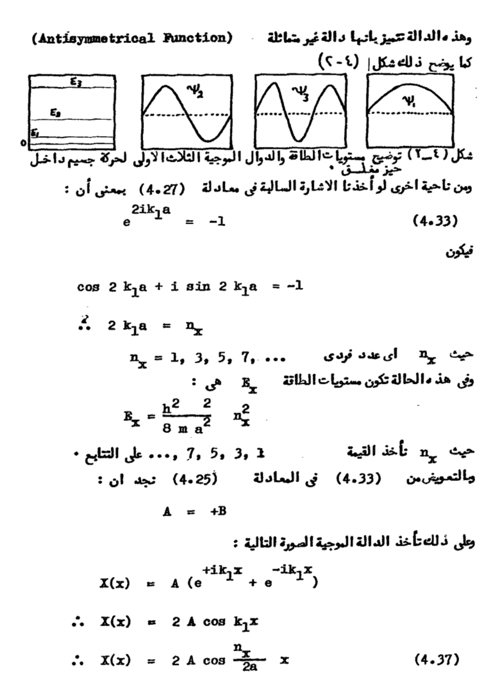
وبالتالى فان المعادلة (4.24) تؤدى الى النتيجة التالية :

$$X(x) = A\,(e^{+ik_1x} - e^{-ik_1x}) \qquad (4.31)$$

$$\therefore \quad X(x) = 2A \cdot i \cdot \sin k_1x$$

$$\therefore \quad X(x) = 2Ai \sin \frac{n_x \pi}{2a} x \qquad (4.32)$$

وهذه الدالة تتميز بانها دالة غير متماثلة (Antisymmetrical Function)
كما يوضح ذلك شكل (٤-٢)



شكل (٤-٢) توضيح مستويات الطاقة والدوال الموجية الثلاث الاولى لحركة جسيم داخل حيز مغلق .

ومن ناحية اخرى لو أخذنا الاشارة السالبة في معادلة (4.27) بمعنى أن :

$$e^{2ik_1a} = -1 \qquad (4.33)$$

فيكون

$$\cos 2\,k_1a + i \sin 2\,k_1a = -1$$

$$\therefore \; 2\,k_1a = n_x$$

حيث n_x اى عدد فردى $n_x = 1,\ 3,\ 5,\ 7,\ \ldots$

وفي هذه الحالة تكون مستويات الطاقة E_x هي :

$$E_x = \frac{h^2 \;\; {}^2}{8\,m\,a^2}\; n_x^2$$

حيث n_x تأخذ القيمة $1,\ 3,\ 5,\ 7,\ \ldots$ على التتابع .

وبالتعويض من (4.33) في المعادلة (4.25) نجد ان :

$$A = +B$$

وعلى ذلك تأخذ الدالة الموجية الصورة التالية :

$$X(x) = A\,(e^{+ik_1x} + e^{-ik_1x})$$

$$\therefore \; X(x) = 2\,A \cos k_1x$$

$$\therefore \; X(x) = 2\,A \cos \frac{n_x}{2a}\; x \qquad (4.37)$$

وهذه الدالة تتميز بانها دالـــة
متماثلة (Symmetrical)
كما هو موضح بالرسم .

ويتبقى لدينا معرفة قيمة الثابت A لاستكمال معلوماتنا عن الدالـة X(x)
ويمكن اتمام ذلك بتطبيق خاصية المعايرة التي تتميز بها الدالة الموجية . فاذا اخترنـا
النتيجة (4.32) فاننا نحصل على :

$$\int_{-a}^{+a} \left(-2 A i \sin \frac{n_x \pi}{2a} x\right) \cdot \left(2 A i \sin \frac{n_x \pi x}{2a}\right) dx = 1$$

$$\therefore \quad 4 A^2 \int_{-a}^{+a} \sin^2 \frac{n_x \pi}{2a} x \, dx = 1$$

$$\therefore \quad 4 A^2 \int_{-a}^{+a} \tfrac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{n_x \pi}{a} x\right) dx = 1$$

$$\therefore \quad 2 A^2 \left[\int_{-a}^{+a} dx - \int_{-a}^{+a} \cos \frac{n_x \pi x}{a} dx\right] = 1$$

$$\therefore \quad 2 A^2 \left[2 a - 0\right] = 1$$

$$\therefore \quad A = \pm \frac{1}{2\sqrt{a}} \qquad (4.38)$$

وعلى ذلك فان الدالة الغير متماثلة تأخذ الصورة التالية :

$$X(x) = \pm \frac{i}{\sqrt{a}} \sin \frac{n_x}{2a} x \,, \quad n_x = 2,4,6,\ldots \qquad (4.39)$$

بينما الدالة المتماثلة تكون على الصورة التالية :

$$X(x) = \pm \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{n_x}{2a} x \,, \quad n_x = 1,3,5,\ldots \qquad (4.40)$$

وباعتبار مركبات حركة الجسيم فى الاتجاهين y ، z نحصل على النتائج التالية :

$$Y(y) = \pm \frac{i}{\sqrt{b}} \sin \frac{n_y \pi}{2b} y \qquad (4.41)$$

أو

$$Y(y) = \pm \frac{i}{\sqrt{b}} \cos \frac{n_y \pi}{2b} y \qquad (4.42)$$

وتقابل مستويات الطاقة

$$E_y = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8 m b^2} n_y^2 \qquad (4.43)$$

وذلك بالنسبة للاحداثى y .

بينما للاحداثى z نحصل على :

$$Z(z) = \pm \frac{i}{\sqrt{c}} \sin \frac{n_z \pi}{2c} z \qquad (4.44)$$

$$Z(z) = \pm \frac{1}{\sqrt{c}} \cos \frac{n_z \pi}{2c} z \qquad (4.45)$$

والتى تقابل مستويات الطاقة

$$E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8 m c^2} n_z^2 \qquad (4.46)$$

وعلى ذلك فالدالة الموجية تكتب على احدى الصورتين الاتيتين :

بالنسبة للدالة الغير متماثلة فان :

$$(\psi)_{n_x, n_y, n_z} = \pm \frac{i}{\sqrt{abc}} (\sin \frac{n_x \pi}{2a} x)(\sin \frac{n_y \pi}{2b} y)(\sin \frac{n_z \pi}{2c} z) \qquad (4.47)$$

بينما الدالة المتماثلة تأخذ الصورة التالية :

$$(\psi)_{n_x, n_y, n_z} = \pm \frac{1}{\sqrt{abc}} (\cos \frac{n_x \pi}{2a} x)(\cos \frac{n_y \pi}{2b} y)(\cos \frac{n_z \pi}{2c} z) \qquad (4.48)$$

وتكون مستويات الطاقة المقابلة هى :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8 m} \left\{ \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right\} \qquad (4.49)$$

درجة عدم الانتمـــــاء : (The Degree of Degeneracy)

نتيجة مباشره للمعادلة (4.49) هناك احتمالان :

١ ـ اذا كان الصندوق على شكل متوازى مستطيلات فيه $a \neq b \neq c$ فان لكل مستوى طاقة E توجد دالة موجية $\psi(x,y,z)$ واحدة فقط تنتمـــى اليه ويسمى هذا المستوى في مثل هذه الحالة بمستوى غير متنكس ويتصف بدرجـــة عدم انتماء مقدارها الوحدة •

٢ ـ بينما اذا حدث ان تساوت الابعاد اى ان $a = b = c$ بمعنـــى ان الصندوق الذى يتحرك داخله الجسيم كان على شكل مكعب فان مستوى الطاقة E تصبح معادلته على الصورة التالية :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8\,m\,a^2}\left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right] \qquad (4.50)$$

فاذا فرضنا على سبيل المثال ان اعداد الكم n_x و n_y و n_z كان لها القيـم التالية : $n_x = 3, \quad n_y = 2, \quad n_z = 4$

فمعنى هذا ان قيمة مستوى الطاقة E هى

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8\,m\,a^2}\left[(3)^2 + (2)^2 + (4)^2\right]$$

$$\therefore \quad E = \frac{h^2 \pi^2}{8\,m\,a^2}\left[\,9 + 4 + 16\,\right]$$

$$\therefore \quad E = \frac{h^2 \pi^2}{8\,m\,a^2} \times 29 \qquad (4.51)$$

وهذا المستوى يقابل الدالة الموجية $\psi_{324}(x, y, z)$

ولكن نفس القيم للطاقة E نحصل عليها بالنسبة للدوال

234	324	423
243	342	432

وبما انه في هذا المثال هناك ست دوال جميعها ينتمي لمستوى طاقة واحد وهـــو المعطى بالمعادلة (4.51) لذا يسمى هذا المستوى بمستوى مختكر ويتصـــف بدرجة عدم انتماء مقدارها ستة . والجدول الاتي يجمع بعض الامثلة :

$\frac{8ma^2}{h^2}\frac{E}{2} = (n_x^2+n_y^2+n_z^2)$	n_x	n_y	n_z	درجة عدم الانتماء
3	1	1	1	1
6	1	1	2	3
	1	2	1	
	2	1	1	
14	1	2	3	6
	1	3	2	
	2	3	1	
	2	1	3	
	3	1	2	
	3	2	1	
29	2	3	4	6
	2	4	3	
	3	2	4	
	3	4	2	
	4	2	3	
	4	3	2	

ملحوظة خاصة بالعلاقة (4.50) :

١ — باعتبار ان الجسيم الذى يتحرك داخل الصندوق هو الكترون داخل ذرتـــه الام فمعنى ذلك ان الكتلة m تساوى (9.1×10^{-31}kg) بينما الابعـاد (a,b,c) هى فى حدود الأنجستروم (Angstrom) اى (10^{-10} m) وعلى ذلك نحصل على مستويات طاقة E فى حدود الالكترون فولـــت وهذا يقابل الواقع الفيزيائى لمستويات الطاقة لاى الكترون داخل الذرة •

٢ — باعتبار ان الجسيم الذى يتحرك داخل الصندوق هو نيوكليون (Nucleon) اى بروتون او نيوترون داخل النواه الذرية فمعنى ذلك ان الكتلـــة m تساوى($1837 \times 9.1 \times 10^{-31}$ kg) بينما الابعاد (a,b,c) هــى فى حدود الفيرمى (Fermi) اى (10^{-15} metre) • وعلى ذلك نحصـل على مستويات طاقة E فى حدود ملايين الالكترون فولت • وهذا يقابـل الواقع الفيزيائى لمستويات الطاقة لاى نيوكليون داخل النواه •

٣ — باعتبار ان الجسيم الذى يتحرك داخل الصندوق هو جسم عادى اى كتلته فــى حدود الجرام بينما ابعاد الصندوق هى الابعاد المعتادة فى الفيزيـــاء الكلاسيكية اى فى حدود السنتيمتر فان التعويض المباشر فى المعادلة (4.50) تعطينا القيم التالية :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8\, m} \left[\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right]$$

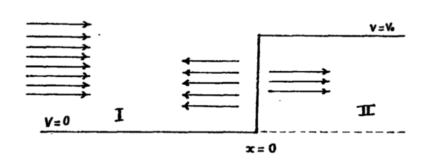
$$= \frac{(1.05 \times 10^{-34})^2 \times (3.14)^2}{8 \times 10^{-3} \times 10^{-2}} \left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right]$$

$$\sim 10^{-63} \left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right]$$

وعلى ذلك فان مستويات الطاقة هى مضاعفات للمقدار المتناهى فى الصغـــر (10^{-63} Joule) وهذا يوضح بجلاء ان لمثل هذه الاجسام العادية التى تحوى عـددا

هائلا من الذرات (وهى ماتسمى بالاجسام الماكروسكوبية) تكون مستويات الطاقـــة الخاصة بها متصلة ومن المستحيل التمييز بينها تجريبيا وعلى ذلك لانستخدم ميكانيكا الكم فى معالجة مثل هذه الاجسام •

حركة جسيم (أو حزمة من الجسيمات) تجاه حاجز جهدى (Potential Barrier) (او سلمة جهدية Potential Step) :



شكل (٤_٣) حزمة من الجسيمات متجهه ناحية سلمية جهدية حيث بعضها ينعكـس والبعض الآخر ينفـذ •

لنفرض ان لدينا سلمة جهدية كالمبينة بالشكل (٤ _ ٣) يتحرك ناحيتهـــا من جهة اليسار حزمة متجانسة من الجسيمات لها الشكل التالى :

$$\Psi_{inc} = A \exp (i\, p_1\, x/\hbar) = A\, e^{ik_1 x} \qquad (4.52)$$

ولنبحث تأثير وجود تلك السلمة الجهدية على حركة هذه الحزمة •

نستطيع ان نكتب المعادلة الموجية التى تمثل حركة الجسيمات داخل كل من المنطقتيـــن (I) ، (II) الموضحتين بالشكل على النحو التالى :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_I}{dx^2} = E\,\Psi_I\,, \quad \text{for } x < 0 \qquad (4.53)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = (E - V_o)\Psi_{II}, \quad \text{for } x \geqslant 0 \qquad (4.54)$$

حيث E الطاقة الكلية للجسيم ، V_0 ارتفاع جهد السلمة .
ويجب علينا ان نُميز بين حالتين :

الحالة الاولى : عندما تكون E اكبر من V_0 :

عندما تكون الطاقة الكلية E اكبر من طاقة الوضع V_0 (ارتفاع جهـــد السلمة) فان طاقة حركة الجسيم $(E-V_0)$ تكون موجبة وبالتالى تكون سرعـــة الجسيم حقيقية .

وعليه فتبعا للميكانيكا الكلاسيكية تستطيع جميع الجسيمات القادمة تجاه السلمـــة ان تتخطاها الى المنطقة الثانية (II) اى انه لاتوجد دقائق منعكسة الى المنطقة الاولى (I) . بينما متوضح لنا ميكانيكا الكم وُجوب احتمال انعكاس بعض هـــذه الدقائق الى المنطقة الاولى متحركة فى عكس اتجاه الحزمة الاصلية القادمة تجـــاه السلمة .

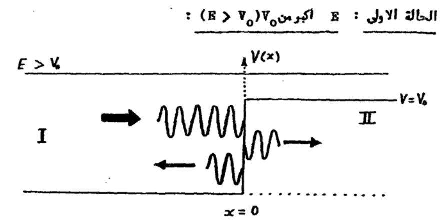
الحالة الثانية : عندما تكون E اصغر من V_0 :

عندما تكون الطاقة الكلية E للجسيم اصغر من طاقة الوضع V_0 فان طاقـــة حركته $(E - V_0)$ تكون مقدارا سالبا وعليه تكون سرعته فى المنطقة الثانية مقـــدارا تخيليا وبالتالى استحالة وجودها فى هذه المنطقة تبعا للميكانيكا الكلاسيكية اى انهـــا تنعكس تماما مرتدة الى المنطقة القادمة منها اى المنطقة الاولى .

من ناحية اخرى فان اساسيات ميكانيكا الكم تُوجب احتمال نفاذ بعض هذه الدقائق الى المنطقة الثانية .

ولنبدأ بدراسة تلك الحالتين كل على حدة :

الحالة الاولى : E اكبر من V_o $(E > V_o)$:



شكل (٤-٤) حاجز جهدى ارتفاعه اقل من طاقة حركة أى من الجسيمات المتجهه ناحيته

فى المنطقة الاولى فان حل المعادلة (4.53) التى تمثل حركة الجسيمات فيهــا يأخذ الصورة التالية :

$$\Psi_I = A\,e^{+ik_1x} + B\,e^{-ik_1x} \quad , \quad x < 0 \qquad (4.55)$$

حيث

$$k_1^2 = \frac{2\,mE}{\hbar^2} \qquad (4.56)$$

كما ان الحل (4.55) يتكون من جزئين هما (Ae^{+ik_1x}) ويمثل حركــــة الجسيمات فى المنطقة الاولى المتجهة تجاه السلمة ، الجزء الاخر هو (Be^{-ik_1x}) ويمثل حركة الجسيمات فى المنطقة الاولى فى اتجاه عكس اتجاه حركة الجسيمات القادمــة وذلك نتيجة انعكاسها عند السلمة الجهدية .

اما حل المعادلة (4.54) التى تمثل حركة الجسيمات فى المنطقة الثانية يأخذ الصورة التالية :

$$\Psi_{II} = C\,e^{+ik_2x} + D\,e^{-ik_2x} \qquad (4.57)$$

حيث

$$k_2^2 = \frac{2\,m\,(E - V_o)}{\hbar^2} > 0 \qquad (4.58)$$

ونلاحظ في المعادلة (4.57) ضرورة وضع الثابت D مساويا للصفر وسبب ذلك فيزيائيا عدم وجود منابع للجسيمات في المنطقة الثانية تكون حركتها تجاه السلمة الجهدية • علاوة على ذلك عدم وجود اي حاجز جهدي آخر يرتد عنده بعض الجسيمات التي تخطت السلمة الجهدية الاولى • وعليه تصبح المعادلة (4.57) على الصورة التالية :

$$\psi_{II} = C\, e^{+ik_2 x} , \quad x > 0 \tag{4.59}$$

وبتطبيق الشروط الحدية لدالة الحالة ψ والمشتقة التفاضلية الاولى لها والتي تنص على :

$$(\psi_I)_{x=0} = (\psi_{II})_{x=0} \tag{4.60}$$

$$(\psi'_I)_{x=0} = (\psi'_{II})_{x=0} \tag{4.61}$$

نحصل على :

$$A + B = C \tag{4.62}$$

$$k_1 A + k_1 B = k_2 C \tag{4.63}$$

وحيث ان الثابت A معلوم من ظروف التجربة لذلك فان من حل المعادلتين (4.62) • (4.63) نحصل على قيمة كل من الثابتين B ، C بدلالة الثابت A على النحو التالي :

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \cdot A \tag{4.64}$$

$$C = \frac{2\, k_1}{k_1 + k_2} \cdot A \tag{4.65}$$

وبتعريف معامل الانعكاسية R(Reflection Coefficient) للسلمة الجهدية على الصورة التالية :

$$R = \frac{\text{شدة التيار المنعكس عند السلمة الجهدية}}{\text{شدة التيار الساقط عليها}} \tag{4.66}$$

$$\therefore R = \frac{\left|(B\, e^{-ik_1x}) \cdot (B\, e^{-ik_1x})\right| \cdot v_I}{\left|(A\, e^{+ik_1x}) \cdot (A\, e^{+ik_1x})\right| \cdot v_I}$$

$$= \frac{|B|^2}{|A|^2} \qquad (4.67)$$

حيث v_I هى سرعة الجسيمات فى المنطقة الاولى :

$$v_I = \frac{\hbar\, k_1}{m} \qquad (4.68)$$

باعتبار ان m كتلة كل جسيم من الحزمة على فرض انها من نوع واحد من الدقائق و متجانسة من حيث الكتلة و السرعة و الطاقة و الشحنة •

بينما يُعرّف معامل النفاذية (Transmission Coefficient) T لنفس السلمة الجهدية على الصورة التالية :

$$T = \frac{\text{شدة التيار النافذ خلال السلمة الجهدية}}{\text{شدة التيار الساقط عليها}} \qquad (4.69)$$

$$\therefore\ T = \frac{\left|(C\, e^{+ik_2x}) \cdot (C\, e^{+ik_2x})\right| \cdot v_{II}}{\left|(A\, e^{+ik_1x}) \cdot (A\, e^{+ik_1x})\right| \cdot v_I}$$

$$= \frac{|C|^2\ v_{II}}{|A|^2\ v_I} \qquad (4.70)$$

حيث v_{II} هى سرعة الجسيمات فى المنطقة الثانية :

$$v_{II} = \frac{\hbar\, k_2}{m} \qquad (4.71)$$

وباستخدام المعادلات (4.64) ، (4.65) ، (4.70) ، (4.71) نحصل على :

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad (4.72)$$

$$T = \frac{4\, k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad (4.73)$$

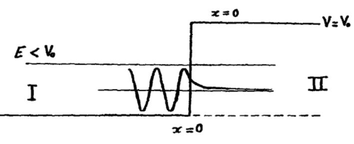
واذا جمعنا المعادلتين (4.72) ، (4.73) نحصل على :

$$T + R = \frac{(k_1 - k_2)^2 + 4\, k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1 \qquad (4.74)$$

وهذه النتيجة تتفق تماما مع قانون بقاء المادة .

الحالة الثانية : E اصغر من V_o :

في هذه الحالة وكما هو موضح من الرسم فان الشروط الحدية تأخذ الصورة التالية :



شكل (٤ـ٥) حاجز جهدى ارتفاعه اكبر من طاقة حركة الجسيم المتجه ناحيته .

$$V(x) = 0 \qquad \text{for } x < 0 \qquad (4.75)$$

$$V(x) = V_o \ (> E) \qquad \text{for } x \geqslant 0 \qquad (4.76)$$

وعلى ذلك تأخذ معادلة شرودنجر الخاصة بحركة الجسيمات فى المنطقة I الشكل التالى :

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2\,mE}{h^2}\,\psi_I = 0 \qquad (4.77)$$

وعلى ذلك يكون الحل فى المنطقة الاولى I هو :

$$\psi_I = A\, e^{+ik_1x} + B\, e^{-ik_1x} \qquad (4.78)$$

حيث مرة اخرى A تُمثل السعة المرتبطة بالجسيمات المتحركة فى المنطقة I تجاه السلمة بينما B تمثل السعة المرتبطة بالجسيمات التى انعكست عند السلمة الجهدية و ارتدت مرة اخرى فى المنطقة الاولى •

$$k_1 = \sqrt{\frac{2\,mE}{\hbar^2}}$$

اما حركة الجسيمات فى المنطقة II فتتمثل بالشكل التالى لمعادلة شرودنجر :

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + \frac{2\,m}{h^2}\,(E - V_o)\,\Psi_{II} = 0$$

وحيث ان V_o اكبر من E فى هذه المعادلة لذا يمكن اعادة كتابتها كما يلى :

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - \frac{2\,m}{h^2}\,(V_o - E)\quad_{II} = 0 \qquad (4.79)$$

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k_2{}^2\,\Psi_{II} = 0$$

حيث

$$k_2 = \sqrt{\frac{2\,m}{\hbar^2}\,(V_o - E)}$$

$$\therefore\ \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + (i^2)\,k_2{}^2\,\Psi_{II} = 0 \qquad (4.80)$$

و على ذلك يأخذ الحل فى المنطقة II الصورة المعتادة التالية

$$\Psi_{II} = C\,e^{+i(ik_2x)} + D\,e^{-i(ik_2x)} \qquad (4.81)$$

$$\therefore\ \Psi_{II} = C\,e^{-k_2x} + D\,e^{+k_2x} \qquad (4.82)$$

وبما ان (De^{+k_2x}) يمثل دالة موجية غير حسنة السلوك فعلينا استبعادها بوضع الثابت D يساوى صفر ا • اما $(C\,e^{-k_2x})$ فيمثل دالة موجية حسنة السلوك مضمحلة لوغاريتميا كلما ازدادت x فى المنطقة الثانية • وعلى ذلك فان حركة الجسيمات فى المنطقة الثانية تمثل بالصورة التالية :

$$\Psi_{II} = C\,e^{-k_2x} \qquad (4.83)$$

مرة اخرى كما اوضحنا فى الحالة السابقة (E اكبر من V_0) فــان الشروط الحدية لدالة الحالة وانحدارها هى :

$$(\psi_I)_{x=0} = (\psi_{II})_{x=0} \qquad (4.84)$$

$$\left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0} \qquad (4.85)$$

$$\therefore \quad A + B = C \qquad (4.86)$$

$$ik_1A - ik_1B = -k_2C \qquad (4.87)$$

$$\therefore \quad B = \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right) A \quad (4.88), \quad C = \left(\frac{2\,k_1}{k_1 + ik_2}\right) A \quad (4.89)$$

وهذا يؤدى الى النتيجة التالية بالنسبة لمعامل الانعكاسية R فى هــذه الحالة :

$$R = \frac{\left|(B\ e^{+ik_1x})\ (B\ e^{-ik_1x})\right|\ v_1}{\left|(A\ e^{-ik_1x})\ (A\ e^{+ik_1x})\right|\ v_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$= \frac{\left|\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1 - ik_2}\right)\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right)\right|\ \left|A\right|^2}{A^2}$$

$$\therefore \quad R = \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2 + k_2^2} = 1 \qquad (4.90)$$

وعلى ذلك يكون معامل النفاذية مساويا :

$$T = 1 - R = 1 - 1 = 0$$

وهذا معناه ان عدد الدقائق التى تتحرك فعلا داخل المنطقة الثانية يســاوى صفرا مع ان المعالجة الكمية اوضحت لنا الاه وجود دالة موجية فى المنطقة الثانيــة وهى تبعا لمعادلة (4.83) تكتب على الصورة :

$$\psi_{II} = C e^{-k_2 x}$$

وهذا بدوره يعني وجود كثافة احتمال للتواجد في المنطقة الثانية قدرها $|\psi_{II}|^2$
وهذا التناقض الظاهري يتلاشى ويمكن فهمه عند حساب قيمة $|\psi_{II}|^2$ حيث
نجدها متناهية الصغر وتؤول للصفر كما يتضح من العلاقة العددية التالية :

لنفرض ان في حالة حزمة الكترونية $(V_0 - E)$ يساوي ١ الكترون فولت

$$\therefore \quad k_2 = \frac{2m(V_0 - E)}{h^2} = \frac{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1 \times 1.6 \times 10^{-19}}{(1.05 \times 10^{-34})^2}$$

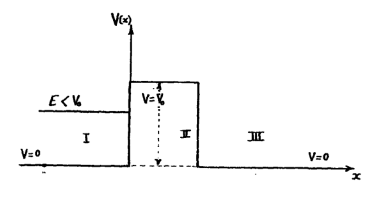
$$= k_2 = 10^9$$

ويكون كثافة الاحتمال :

$$\therefore \quad |\psi_{II}|^2 \sim e^{-k_2 x} \simeq 0$$

<u>حركة جسيم (أو حزمة من الجسيمات) تجاه هضبة جهدية (تأثير النفق)</u>

<u>The Tunnel Effect</u>



شكل (٤ــ٦) رسم توضيحي للهضبة الجهدية .

في الشكل (٤ ـ ٦) موضح حيز مقسم الى ثلاث مناطق :

<u>المنطقة الاولى I</u> : وفيها تتحرك حزمة من الجسيمات المتجانسة من اليسار الـــى اليمين تجاه هضبة جهدية ارتفاعها V_0 بطاقة حركة تساوى الطاقة الكلية E لان قيمة $V(x)$ تساوى صفرا •

<u>المنطقة الثانية II</u> : وهى تمثل الحيز الذى تشغله الهضبة الجهدية وهى تمتـــد من $x = 0$ الى $x = a$ وتتحرك فيها الجسيمات بطاقة حركة تساوى $(E - V_0)$ اى سالبة لان V_0 اكبر من E •

<u>المنطقة الثالثة III</u> : وهى تمثل الحيز الذى يمتد لجميع قيم x اكبر مـــن a وفيها تتحرك الجسيمات بطاقة حركة تساوى الطاقة الكلية E لان قيمة الجهـــد V تساوى صفرا • تماما مثل المنطقة الاولى •

اتضح لنا من دراسة السلمة الجهدية فى حالة طاقة الوضع V_0 اكبر مـــــن الطاقة الكلية E ان معامل النفاذية للجسيمات القادمة تجاهها يساوى صفرا • ولكـن سيتضح لنا من المعالجة الكمية الحركة لايساوى صفرا وهذا معناه ان نسبة معينة مـــن الجسيمات سوف تنفذ الى المنطقة الثالثة وتتحرك فيها وسبب ذلك ان الهضبة الجهديـــة تتميز باتساع محدد بخلاف حالة السلمة الجهدية التى فيها ينقسم الحيز الى منطقتيـــن فقط عند x تساوى صفرا • وكما هو متبع فان معادلة شرودنجر تأخذ الصور التاليـــة لهذه المناطق الثلاث :

<u>فى المنطقة I</u> :

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2 \psi_I = 0 \tag{4.91}$$

حيث

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{4.92}$$

في المنطقة II :

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k_o^2\ \Psi_{II} = 0 \qquad (4.93)$$

حيث

$$k_o = \sqrt{\frac{2m\ (V_o - E)}{\hbar^2}} \qquad (4.94)$$

في المنطقة III :

$$\frac{d^2\Psi_{III}}{dx^2} + k^2\ \Psi_{III} = 0 \qquad (4.95)$$

وحلول تلك المعادلات على التوالي هي :

$$\Psi_I = A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx} \qquad (4.96)$$

$$\Psi_{II} = A_2e^{+k_ox} + B_2e^{-k_ox} \qquad (4.97)$$

$$\Psi_{III} = A_3\ e^{ikx} \qquad (4.98)$$

في المعادلة الاخيرة (4.98) مرة اخرى اكتفينا بالحد A_3e^{ikx} وهو يمثل الحركة الموجية للجسيمات التي نفذت خلال الهضبة متحركة جهة اليمين ولايوجد في هذه المنطقة III منابع لجسيمات تتحرك مرتدة نحو الهضبة في الاتجاه العكس.
وواضح ان انحدارات تلك الدوال Ψ_I ، Ψ_{II} ، Ψ_{III} هي :

$$\Psi'_I = ikA_1e^{ikx} - ikB_1e^{-ikx} \qquad (4.99)$$

$$\Psi'_{II} = k_o\ A_2\ e^{+k_ox} - k_o\ B_2\ e^{-k_ox} \qquad (4.100)$$

$$\Psi'_{III} = ik\ A_3\ e^{ikx} \qquad (4.101)$$

ويمكننا الان تعريف معامل النفاذية T للهضبة الجهدية بالنسبة للجسيمات القادمة تجاهها كما يلي :

$$T = \frac{\text{عدد الجسيمات التى نفذت الى المنطقة الثالثة}}{\text{عدد الجسيمات القادمة تجاه الهضبة فى المنطقة الاولـى}}$$

$$= \frac{|\psi_{III}|^2 \; v_1}{|A_1 \; e^{ikx}|^2 \; v_1}$$

$$\therefore \; T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \qquad (4.102)$$

وعلى ذلك علينا الان الاستفادة من الشروط الحدية للدوال ψ_I ، ψ_{II} ، ψ_{III} وانحداراتها (ψ'_I ، ψ'_{II} ، ψ'_{III}) عند الحدين $x = 0$ ، $x = a$ لحساب معامل النفاذية T كما يلى :

$$(\psi_I)_{x=0} = (\psi_{II})_{x=0} \qquad (\psi'_I)_{x=0} = (\psi'_{II})_{x=0}$$

$$(\psi_{II})_{x=a} = (\psi_{III})_{x=a} \qquad (\psi_{II})_{x=a} = (\psi'_{III})_{x=0}$$

$$\therefore \; A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \qquad (4.103)$$

$$ikA_1 - ikB_1 = k_oA_2 - k_oB_2 \qquad (4.104)$$

$$A_2 \; e^{k_oa} + B_2 \; e^{-k_oa} = A_3 \; e^{ika} \qquad (4.105)$$

$$k_oA_2 \; e^{k_oa} - k_oB_2e^{-k_oa} = ikA_3e^{ika} \qquad (4.106)$$

بضرب المعادلة (4.103) فى ik نحصل على :

$$ikA_1 + ikB_1 = ikA_2 + ikB_2 \qquad (4.107)$$

اذن بجمع (4.107) ، (4.104) نحصل على :

$$A_1 = \tfrac{1}{2}\left(1 + \frac{k_o}{ik}\right) A_2 + \tfrac{1}{2}\left(1 - \frac{k_o}{ik}\right) B_2 \qquad (4.108)$$

والان من معادلة (4.105) ، (4.106) نحاول ان نستنتج تعبيرا لكل من A_2 ، B_2 بدلالة A_3 ثم نعوضهما في معادلة (4.108) لنحصل على معادلة تربط بين A_1 ، A_3 بدلالة الثوابت الخاصة بالمسألة الفيزيائية التي ندرسها • ويتم ذلك على النحو التالي :

بضرب (4.105) في k_o نحصل على :

$$k_o A_2 e^{k_o a} + k_o B_2 e^{-k_o a} = k_o A_3 e^{ika} \qquad (4.109)$$

وبجمع (4.109) ، (4.106) نحصل على

$$A_2 = ½ (1 + \frac{ik}{k_o}) A_3 e^{ika-k_o a} \qquad (4.110)$$

وبطرح (4.106) من (4.109) نحصل على :

$$B_2 = ½ (1 - \frac{ik}{k_o}) A_3 e^{ika +k_o a} \qquad (4.111)$$

وبالتعويض من (4.110) ، (4.111) في المعادلة (4.108) نحصل على :

$$A_1 = ½ (1 - \frac{ik_o}{k}) \left[½ (1 + \frac{ik}{k_o}) A_3 e^{ika-k_o a} \right]$$

$$+ ½ (1 + \frac{ik_o}{k}) \left[½ (1 - \frac{ik}{k_o}) A_3 e^{ika+k_o a} \right]$$

$$= ¼ A_3 e^{ika} \left[(2 + i (\frac{k}{k_o} - \frac{k_o}{k})) e^{-k_o a} \right.$$

$$\left. + (2 - i (\frac{k}{k_o} - \frac{k_o}{k})) e^{+k_o a} \right]$$

$$\therefore \left| \frac{A_1}{A_3} \right|^2 = \frac{1}{T} = \frac{1}{16} \frac{k^2}{k_o^2} \left[(2\frac{k_o}{k} + i\,(1 - \frac{k_o^2}{k^2}))\, e^{-k_o a} + (2\frac{k_o}{k} - i\,(1 - \frac{k_o^2}{k^2}))\, e^{+k_o a} \right] + \left[(2\frac{k_o}{k} - i\,(1 - \frac{k_o^2}{k^2}))\, e^{-k_o a} + (2\frac{k_o}{k} + i\,(1 - \frac{k_o^2}{k^2}))\, e^{+k_o a} \right] \qquad (4.112)$$

وهذا هو التعبير العام لمقلوب معامل النفاذية • وحيث انه في معظم المسائـــــــل الفيزيائية التي يحدث فيها هذا التأثير النفقي يكون سمك الجدار الجهدى (سمـــك الهضبة) a كبيرا بالنسبة لطول موجه دى برولي للجسيم في المنطقـــــــة II لذا يمكننا اختزال (4.112) الى الصورة التالية :

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{16} \frac{k^2}{k_o^2} \left[e^{2k_o a} \left(4\,(\frac{k_o}{k})^2 + (1 - \frac{k_o^2}{k^2})^2 \right) \right]$$

$$= \frac{1}{16} \frac{k^2}{k_o^2} \left[4\,(\frac{k_o}{k})^2 + 1 + \frac{k_o^4}{k^4} - 2\frac{k_o^2}{k^2} \right] e^{2k_o a}$$

$$= \frac{1}{16} \frac{k^2}{k_o^2} (1 + \frac{k_o^2}{k^2})^2 \; e^{2k_o a}$$

$$\therefore \quad T = 16 \frac{k_o^2}{k^2} \; e^{-2k_o a} \; (1 + \frac{k_o^2}{k^2})^{-2}$$

وبالتعويض عن كل من k_o ، k بدلالة E ، V_o نحصل على :

$$T = 16\,\frac{\frac{2\,m(V_o - E)}{\hbar^2}}{\frac{2\,mE}{\hbar^2}}\left[1 + \frac{\frac{2\,m(V_o - E)}{\hbar^2}}{\frac{2\,mE}{\hbar^2}}\right]^{-2} e^{-2k_oa}$$

$$= 16\,.\,\frac{V - E}{E}\left[1 + \frac{V_o - E}{E}\right]^{-2} e^{-2k_oa}$$

$$= 16\,.\,\frac{V_o - E}{E}\left[\frac{E + V_o - E}{E}\right]^{-2} e^{-2k_oa}$$

$$= 16\,.\,\frac{V_o - E}{E}\left[\frac{E^2}{V_o^2}\right] e^{-2k_oa}$$

$$\therefore\quad T = 16\,(1 - \frac{E}{V_o})\,\frac{E}{V_o}\,e^{-2k_oa} \qquad (4.113)$$

$$\therefore\quad T = 16\,(1 - \frac{E}{V_o})\,\frac{E}{V_o}\,e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_o-E)}} \qquad (4.114)$$

مثـــال (٤ ـ ١) :

احسب مستويات الطاقة الثلاث الاولى لحركة الكترون داخل ذرته الأم علـــى فرض ان تلك الحركة تماثل تقريبا حركة جسيم داخل صندوق مغلق وبفرض ان قطـــر الذرة يساوى ٢,٥ أنجستروم • ثم احسب الطول الموجى للاشعاع الكهرومغناطيســى الذى ينبعث نتيجة انتقال مثل هذا الالكترون من المستوى الثالث الى المستوى الاول •

كرر حل المسألة بالنسبة لحركة نيوكليون داخل نواة الذرة وبفرض ان قطر النـــواه يساوى ٢,٥ فيرمى •

الحـــــل :

علمنا ان مستوى الطاقة E_n المقابل لعدد الكم n لحركة جسيم داخـل صندوق تعطى بالعلاقة :

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\ m\ a^2} \cdot n^2 \qquad \text{--(1)}$$

اذاً بالنسبة لحركة الكترون داخل ذرته يكون :

$$E_n = \frac{(3.14)^2 \cdot (1.05 \times 10^{-34}\ J.s)^2}{8 \cdot (9.1 \times 10^{-31}\ kg) \cdot (2.5 \times 10^{-10}\ m)^2} \cdot n^2 \text{--(2)}$$

$$\therefore E_n = \frac{10.87 \times 10^{-68} \cdot n^2}{4.55 \times 10^{-49}} = (2.39 \times 10^{-19}) \cdot n^2 \quad J$$

$$= 1.49\ n^2 \quad eV$$

$$\therefore E_1 = 1.49\ eV$$

$$,\ E_2 = 1.49 \times 4 = 5.96\ eV$$

$$,\ E_3 = 1.49 \times 9 = 13.41\ eV$$

$$\therefore E_3 - E_1 = 13.41 - 1.49 = 11.92\ eV = hf = hc/\lambda$$

اذاً الطول الموجي للاشعاع الكهرومغناطيسي المنبعث نتيجة انتقال الالكترون مـــن المستوى الثالث الى المستوى الاول λ حيث :

$$\lambda_{atomic} = \frac{hc}{11.92 \times 1.6 \times 10^{-19}} = 1.04 \times 10^{-7}\ m = 1040\ \AA$$

وبالمثل بالنسبة لحركة النيوكليون داخل النواة فان :

$$E_n = \frac{(3.14)^2 \cdot (1.05 \times 10^{-34})^2 \cdot n^2}{8\ (1.67 \times 10^{-27}\ kg)\ (2.5 \times 10^{-15}\ m)} = (1.3 \times 10^{-12}).n^2$$

$$= 8.13\ n^2\ \ Mev$$

$$\therefore\ E_1 = 8.13\ \ Mev$$

$$E_2 = 32.52\ \ Mev$$

$$E_3 = 73.17\ \ Mev$$

$$\therefore\ E_3 - E_1 = 65.04\ Mev = 1.041 \times 10^{-11}\ \ J$$

$$\therefore\ \lambda_{nuclear} = 1.8 \times 10^{-14}\ m = 8\ Fermis$$

ومن هذا المثال التوضيحى نجد انقيم مستويات الطاقة لحركة النيوكليونـــــات داخل النواه حوالى مليون مرة مثيلاتها لحركة الالكترونات داخل الذرة الأم وهـــــذا يفسر سبب ان الطاقة النووية اكبر بملايين المرات الطاقة الكيمائية ٠

مثـــال (٤ _ ٢) :

جسيم الفا حر الحركة فى اتجاه مفرد داخل صندوق جهد اوجد :

أ _ القيم الذاتية للطاقة للمستويات الثلاث الاولى اذا كان اتساع الصنـــــــدوق a = ٢ سم ٠ وناقش النتيجة ٠

ب _ القيم الذاتية للطاقة للمستويات الثلاث الاولى اذا كان اتساع الصنـــــــدوق a = ٦,١ فيرمى ٠ وناقش النتيجة ايضا ٠

ثم اوجد بالنسبة للحالة الثانية (ب) مايأتى : احتمال تواجد جسيم الفا ذى المستوى الادنى للطاقة عند الموضع x حيث x تقع فى المدى

$$\frac{a}{3} < x < \frac{2a}{3}$$

الحـــل :

أ ــ عندما يكون اتساع الصندوق ٢ سم

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\ m\ a^2} = \frac{(3.14)^2.(1.05 \times 10^{-34})^2\ n^2}{8\ .\ (6.68 \times 10^{-27}).(0.02)^2}$$

$$= (0.51 \times 10^{-38})\ n^2\ J \quad = \quad (0.32 \times 10^{-19})\ n^2\ eV$$

وواضح ان قيم مستويات الطاقة صغيرة جدا وبالتالي الفروق بينها تكاد تكـــون منعدمة • مُكونة شريطا متصلا من الطاقة •

ب ــ عندما يكون اتساع صندوق الجهد ٦,١ فيرمى ثان :

$$E_n = \frac{(3.14)^2.(1.05 \times 10^{-34})^2\ .\ n^2}{8\ .\ (6.68 \times 10^{-27}).(6.1 \times 10^{-15})^2}$$

$$= (0.55 \times 10^{-13})\ n^2\ J \quad = \quad 0.34\ n^2 \quad Mev$$

$E_1 = 0.34 \quad Mev$

$E_2 = 1.36 \quad Mev$

$E_3 = 3.06 \quad Mev$

ويتضح من هذه النتيجة فى هذه الحالة ان مستويات الطاقة لها قيم داخـــل مدى طاقـات الجسيمات النووية • كما يتضح ان الفروق بينها يُمكن تمييزها عـن بعضها •

وبالنسبة لاحتمال تواجد جسيم الفا فى المدى $a/3$ • $2\ a/3$:

$$P = \int_{a/3}^{2a/3} \psi^*_n\ \psi_n\ dx$$

حيث

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

$$\therefore \psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$$

اذا احتمال التواجد هو :

$$P = \frac{2}{a} \int_{a/3}^{2a/3} \sin^2 \frac{\pi x}{a} \, dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_{a/3}^{2a/3} \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{1}{a} \left\{ (x) - \frac{a}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a} \right\}_{a/3}^{2a/3} = 0.609$$

مثــال (٤ ـ ٣) :

حزمة الكترونية طاقة حركتها ٢٠ الكترون فولت متجهة ناحية سلمة جهديـــــة ارتفاعها ١٢ الكترون فولت • احسب كلا من معامل الانعكاسية R ومعامـــــل النفاذية T •

الحـــل :

رأينا ان :

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \quad , \quad T = \frac{4 k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

حيث

$$k_1 = \frac{2\,m\,E}{\hbar^2}$$

$$= \frac{2\,.\,(9.1 \times 10^{-31}).(20 \times 1.6 \times 10^{-19})}{(1.05 \times 10^{-34})^2}^{½} = 2.298\times10^{10}\ m^{-1}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2\,m\,(E - V)}{h^2}} = 1.454 \times 10^{10} \quad m^{-1}$$

$$\therefore \quad R = \left(\frac{2.298 - 1.454}{2.298 + 1.454}\right)^2 = 0.051$$

$$T = \frac{4 \times 2.298 \times 1.454}{(3.752)^2} = 0.949$$

مثـــال (٤ ـ ٤) :

اذا كانت دالة الجهد $V(x)$ تساوى صفرا للقيم x اقل من 0 بينمـــا تساوى V_o للقيم x اكبر من 0 . اثبت ان $\psi(x)$ تؤول للصفر عندمـــا V_o تؤول الى مالانهاية .

الحـــل :

بما ان $V(x)$ تساوى صفرا فى حالة $x < 0$ ، تساوى V_o فى حالـــة $x > 0$ فان معادلة شرودنجر تأخذ الصورتين التاليتين :

عندما تكون $x < 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\,mE}{h^2}\psi = 0$$

وعندما تكون $x > 0$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2\,m}{h^2}(V_o - E)\psi = 0$$

وعلى فرض ان $0 < E < V_o$ فان حلولهما هى :

عندما تكون $x < 0$

$$\psi = A \cos kx + B \sin kx$$

عندما تكون $x > 0$

$$\psi = C e^{-Kx}$$

حيث

$$k^2 = \frac{2\, mE}{\hbar^2}$$

$$K^2 = \frac{2\, m}{\hbar^2} (V_o - E)$$

وبالاستفادة من خاصية الاستمرارية للدالة ψ ومشتقتها الاولى $\frac{d\psi}{dx}$ عنـــد $x = 0$ نجد ان :

$$A = C$$

$$,\quad kB = -KC$$

فاذا قربت V_o من ∞ تقرب K بالتالى من ∞ وعليه فان C يجـــب ان تقرب من الصفر لنضمن ان يكون الحل الظاهر بالمنطقة $x < 0$ محدد ومعنـــى ذلك :

عند $x \geqslant 0$

$$\psi = C e^{-Kx} = 0$$

اى تتلاشى الدالة ψ فى هذا المدى ٠

مثـــال (٤ ـ ٥) :

اثبت ان الحلين العامين

$$u(x) = A \cos kx + B \sin kx \qquad (a)$$

$$u(x) = C\, e^{-ikx} + D\, e^{-ikx} \qquad (b)$$

لايحققان شرط المعايرة لدوال الحالة •

الحـــل :

تبعا لشرط المعايرة فان :

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)\, u(x)\, dx = 1$$

ولكن بالنسبة للحل (a) نجد ان :

$$\int_{-\infty}^{\infty} (A \cos kx + B \sin kx)^2\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (A^2 \cos^2 kx + B^2 \sin^2 kx + 2\, AB \sin kx . \cos kx) dx$$

$$= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \tfrac{1}{2} (1 + \cos 2\, kx) + B^2 \int_{-\infty}^{\infty} \tfrac{1}{2}(1 - \cos 2\, kx)\, dx$$

$$+ \frac{2\, AB}{k} \int_{-\infty}^{\infty} \sin kx\, d\, (\sin kx)$$

$$= A^2 \int_{0}^{\infty} (1 + \cos 2\, kx)\, dx + B^2 \int_{0}^{\infty} (1 - \cos 2\, kx)\, dx$$

$$+ \frac{2\, AB}{k} \int_{-\infty}^{\infty} \sin kx\, d\, (\sin kx)$$

$$= 2\ A^2 \left[x + \frac{1}{2\ k} (\sin 2\ kx) \right]_0^\infty$$

$$+ B^2 \left[x - \frac{1}{2\ k} (\sin 2\ kx) \right]_0^\infty$$

$$+ \frac{2\ AB}{k} \left[\tfrac{1}{2} \sin^2 kx \right]_{-\infty}^{\infty} = \infty$$

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty} u^* (x) . u(x)\ dx \neq 1$$

اى ان هذا الحل لايحقق شرط المعايرة •

وبالمثل بالنسبة للحل الآخر نجد ان :

$$\int_{-\infty}^{\infty} (C\ e^{+ik} + D\ e^{-ikx}) \quad (C\ e^{+ikx} + D\ e^{-ikx})\ dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (C^2 + D^2 + 2\ DC)\ dx = \infty \neq 1$$

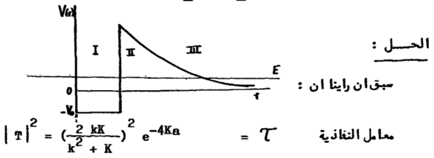
∴ هذا الحل ايضا لايحقق شرط المعايرة •

وهذا المثال يوضح لنا ان شرط المعايرة للدالة الموجية مرتبط ارتباطا وثيقـــا بالشروط الحدية الخاصة بالمجموعة الفيزيائية التى تمثلها تلك الدالة •

مثـــال (٤ _ ٦) :

استنتج التعبير الخاص بمعامل النفاذية للهضبة الموضحة بالشكل ثم طبق النتيجة التى تحصل عليها لشرح انطلاق جسيمات الفا من أنوية العناصر المشعة ثم احســـب كذلك (بالتقريب) متوسط العمر لعنصر مشع $^{216}_{82}X$ تنبعث منه جسيمات الفا ذات طاقة حركة تساوى ٨٫٥ مليون الكترون فولت لكل منها •

الحــــل :



سبق ان راينا ان :

$$|T|^2 = \left(\frac{2\,kK}{k^2 + K}\right)^2 e^{-4Ka} \qquad = \tau \qquad \text{معامل النفاذية}$$

$$, \therefore \tau = 16 \cdot \frac{E}{V_o}\left(1 - \frac{E}{V_o}\right) e^{-2\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_o-E)}}$$

وبما ان معدل التآكل الاشعاعى كل ثانية يتناسب مع عدد الانوية المشعة الموجـــــودة تبعا للقانون :

$$\frac{dN}{dt} = - \lambda N$$

فان ثابت التاكل λ يمثل احتمال اى من الانوية الموجودة للتآكل خلال وحـــــــدة الزمن • وهذا بالتالى معناه ان بفرض ان جسيم الفا قبل انطلاقه من النـــــواه الام كان موجودا طوال الوقت داخلها ومتحركا داخل حيزها بسرعة v فانه يصطـــــــدم بجدارها الداخلى عددا من المرات كل ثانية مساويا $(v/2R)$ حيــــث $2R$ قطر النواه • وحيث ان فى كل مرة هناك احتمال لنفاذه مساويا τ • اذاً احتمـــال انطلاق الجسيم الفا فى الثانية الواحدة (اى احتمال اى من الانوية الموجـــــــودة للتاكل λ) هو :

$$\lambda = \frac{v}{2R}\tau$$

اذاً متوسط عمر النظير المشع لجسيمات الفا هو :

$$\bar{t} = \frac{1}{\lambda} = \frac{2R}{v} \cdot \frac{1}{\tau}$$

وفى هذه المسألة لدينا :

$$2R = 2(r_o A^{1/3}) = 2(1.25 \times 10^{-15}\ m)(216)^{1/3}$$

$$= 1.5 \times 10^{-14}\ m$$

$$, v = \sqrt{\frac{2 \times 5.8 \times 1.6 \times 10^{-13}}{6.58 \times 10^{-27}}} = 1.67 \times 10^{7} \quad m.s^{-1}$$

$$, \tau = 16 \cdot \frac{E}{V_o} \cdot \left(1 - \frac{E}{V_o}\right) e^{-2\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_o - E)}}$$

حيث

$$E = 5.8\ Mev = 5.8 \times 10^{6} \times 1.6 \times 10^{-19} \quad J$$

$$V_o = \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \cdot \frac{(2e)(Ze)}{R}$$

$$= 9 \times 10^{9} \frac{(2 \times 1.6 \times 10^{-19}) \cdot (82 \times 1.6 \times 10^{-19})}{0.75 \times 10^{-14}}$$

$$= 5.038 \times 10^{-12}\ J = 31.5\ Mev$$

$$\therefore \bar{t} = 10^{-19}\ sec$$

مثـــال (٤ ـ ٧) :

وضح انه في اى مسألة في ميكانيكا الكم تتصف بحركة جسيم في بعد واحد فــان طيف مستويات الطاقة للحالات الكمية المرتبطة (الغير حرة) يتميز بعدم الانتماء ٠

الحـــل :

لنفترض ان العكس هو الواقع الحقيقي فمعنى ذلك انه اذا كانت $\psi_1(x)$ ، $\psi_2(x)$ دالتين موجيتين مستقلتين استقلالا خطيا وتنتميان لنفس مستوى الطاقـــة ذى القيمة الذاتية E ٠ ومعنى ذلك :

$$\frac{d^2\psi_1}{dt^2} + \frac{2m}{h^2}(E - V)\psi_1 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dt^2} + \frac{2m}{h^2}(E - V)\psi_2 = 0$$

تؤديان الى :

$$\frac{\psi_1^{11}}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$$

أى ان :

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = (\psi_1'\psi_2)' - (\psi_2'\psi_1)' = 0$$

وباجراء التكامل :

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = \text{a constant}$$

وحيث انه عند $x \to \infty$ تتلاشى كل من ψ_1 ، ψ_2 (حالات مرتبطــة) فهذا معناه أن الثابت في المعادلة الاخيرة يجب ان تساويه بالصفر

$$\therefore \frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$$

وبإجراء التكامل مرة أخرى

$$\therefore \quad \psi_1 = C \cdot \psi_2$$

وهذا يتعارض مع الفرض الذى بدأنا به وهو عدم اعتماد ψ_1 ، ψ_2 على بعضهما اعتمادا خطيا . وعلى ذلك فان ψ_1 ، ψ_2 يجب ان تتميز بعدم الانتماء .

مثـــال (٤ ـ ٨) :

عيّن مستويات الطاقة الذاتية وكذلك الدوال الايجينيـــة المقابلة لجسيم يتحرك داخل مكعب طول ضلعه L يتصف بجهد متميز بالشروط الحدية التالية :

$$V(x,y,z) = 0 \quad , \quad 0 < x < L \; ; \quad 0 < y < L; \quad 0 < z < L,$$

$= \infty$ خارج الصندوق

الحـــــل :

معادلة شرودنجر داخل المكعب حيث الجهد V يساوى صفرا هى :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2\,mE}{\hbar^2}\,\psi\,(x,y,z) = 0$$

وباستخدام طريقة فصل المتغيرات مع وضع الدالة ψ فى الصورة :

$$\psi\,(x,y,z) = X(x)\;Y(y)\;Z(z)$$

نحصل على المعادلة :

$$\left[\frac{1}{X(x)}\,\frac{d^2X}{dx^2}\right] + \left[\frac{1}{Y(y)}\,\frac{d^2Y}{dy^2}\right] + \left[\frac{1}{Z(z)}\,\frac{d^2Z}{dz^2}\right] = -\,\frac{2\,mE}{\hbar^2}$$

ونلاحظ فى الطرف الايسر منها ان الحد الاول هو دالة للمتغير x فقط ، الثانـــى دالة للمتغير y فقط والثالث دالة للمتغير z فقط بينما الطرف الايمن منهـــا مستقل عن المتغيرات الثلاث z,y,x • وعلى ذلك فان كل حد داخل قوسيـــن موجبين يجب ان يساوى ثابت على حدة ولتكن كما يلى :

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} = -k_x^2 \quad , \quad \therefore X(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_x \pi}{L} x$$

$$\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} = -k_y^2 \quad , \quad \therefore Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_y \pi}{L} y$$

$$\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = -k_z^2 \quad , \quad \therefore Z(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n_z \pi}{L} z$$

كما أن :

$$\frac{2\,mE}{\hbar^2} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

$$= \left(\frac{n_x \pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L}\right)^2$$

$$\therefore E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\,mL^2}\left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right]$$

$$= X(x)\;Y(y)\;Z(z)$$

$$= \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin \frac{n_x \pi}{L} \sin \frac{n_y \pi}{L} \sin \frac{n_z \pi}{L}$$

مثـــال (٤ ـ ٩) :

جسيم يتحرك داخل صندوق طول ضلعه L ويمثل بدالة موجيه :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{ik \cdot r}$$

بشروط حديه :

$$\psi(x = 0, y, z) = \psi(x = L, y, z)$$

$$\psi(x, y = 0, z) = \psi(x, y = L, z)$$

$$\psi(x, y, z = 0) = \psi(x, y, z = L)$$

استنتج علاقة تعطى عدد الحالات الموجيه للجسيم فى وحدة الحجوم داخل هـــذا الصندوق ٠

الحـــل :

حيث ان : $\psi = \psi(x, y, z)$

اذاً باتباع اسلوب فصل المتغيرات لحل معادلة شرودنجر :

$$\nabla^2 \psi(x,y,z) + \frac{2mE}{h^2} \psi(x,y,z) = 0$$

نستنتج ان :

$$\psi = \frac{1}{L^3} \sin \frac{2\pi n_x}{L} x \sin \frac{2\pi n_y}{L} y \sin \frac{2\pi n_z}{L} z$$

$$= \frac{1}{L^3} \sin k_x \cdot x \sin k_y \cdot y \sin k_z \cdot z$$

حيث تأخذ الاعداد n قيما صحيحة موجبه او سالبة •
وحيث ان عدد الحالات الموجيه التى تقع المركبة السينية للعدد الموجى k بيـــن (k_x) ، $(k_x + dk_x)$ يكون مساويا للاعداد n_x التى تقع بيـــن $(\frac{L\,k_x}{2\pi})$ ، $\frac{L}{2\pi}(k_x + dk_x)$ اى مساويا تقريبا للعدد $\frac{L}{2\pi}\,dk_x$
اذا عدد الحالات الموجيه التى تقع فى المدى $dk_x\,dk_y\,dk_z$ للعـدد الموجى k هو

$$(\frac{L}{2\pi})^3\,dk_x\,dk_y\,dk_z$$

واذا رمزنا بالرمز $g\,(k,\Omega)\,dk\,d\Omega$ لعدد الحالات التى يقع العـدد الموجى k بين k ، $k + dk$ خلال الزاوية المجسمة $d\Omega$ فان :

$$g(k,\Omega)\,dk\,d\Omega = (\frac{L}{2\pi})^3\,k^2\,dk\,d\Omega$$

$$= \frac{V}{8\,\pi^3}\,k^2\,dk\,\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

وبما ان :

$$E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m}\;;\;dE = \frac{\hbar^2\,k}{m}\,dk$$

$$\therefore\; g(E,\Omega)\,dE\,d\Omega = \frac{V}{16\,\pi^3\,h^3}\,(2\,m)^{3/2}\,E^{1/2}\,dE\,d\Omega$$

واذا فرضنا

$$\rho(E) = g(E,\Omega)\,d\Omega$$

$$\therefore\;\rho(E) = \frac{V}{16\,\pi^3\,h^3}\,(2\,m)^{3/2}\,E^{1/2}\,d\Omega$$

$$= \frac{m\,V}{8\,\pi^3\,\hbar^2}\,k\,d\Omega$$

بينما العدد الكلى للحالات بين الطاقة E ، الطاقة $E + dE$ يمكننا الحصـــول عليه باجراء التكامل على الزاوية المجسمة :

$$g(E)\ dE = \frac{V}{16\ \pi^3\ h^3}\ (2\ m)^{3/2}\ E^{1/2}\ dE\ .\ 4\pi$$

$$\therefore \quad g(E)\ dE = \frac{V}{4\ \pi^2\ \hbar^3}\ (2\ m)^{3/2}\ E^{1/2}\ dE$$

ملحوظـة : نفس هذه النتيجة نحصل عليها عند حساب كثافة عدد حالات الكـــــم $g(E)\ dE$ لجسيم يتحرك داخل صندوق يتميز بأن الجهد عند جدرانه يقرب مـــن مالانهاية بمعنى ان دالة الحالة تختفى عند الجدران مع ملاحظة ان القيـــــــم k_x و k_y و k_z المسموح بها فى هذه الحالة هى :

$$k_x = \frac{\pi n_x}{L} \quad , \quad k_y = \frac{\pi n_y}{L} \quad , \quad k_z = \frac{\pi n_z}{L}$$

حيث الاعداد n_x و n_y و n_z تأخذ فقط قيماً صحيحة مُوجبه .

مثـــال (٤ ـ ١٠) :

من المثال السابق وعلى اعتبار ان الالكترونات فى المعادن تتحرك بحرية فـــى ثلاث ابعاد داخل صندوق وعلى فرض ان احتمال ايجاد الكترون بطاقة E يُعطـــى بالعلاقة :

$$F(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}}$$

استنتج علاقة لحساب E_F عندما تكون قيمة E_F اكبر بكثير من kT

الحـــل :

من المثال السابق وجدنا ان :

$$g(E) = \frac{2\ mV}{\pi^2\ \hbar^3}\ (½\ mE)^{½}$$

وعليه فان عدد الالكترونات n في وحدة الحجوم من المعدن هي :

$$n = \frac{1}{V} \int_0^{\infty} g(E)\ .\ F(E)\ .\ dE$$

$$= \frac{(2\ m)^{3/2}}{2\ \pi^2\ \hbar^3} \int_0^{\infty} E^{½}\ \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}}\ dE$$

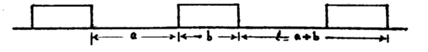
وعند $T = 0$ فان توزيع فيرمى $F(E)$ يكون عبارة عن توزيع درجى ويؤدى الى :

$$n = \frac{(2\ m)^{3/2}}{2\ \pi^2\ \hbar^3} \int_0^{E_{F_o}} E^{½}\ dE = \frac{(2\ m)^{3/2}}{2\ \pi^2\ h^3}\ (\frac{2}{3}\ E_{F_o}^{3/2})$$

$$\therefore\ E_{F_o} = \frac{\hbar^2}{2\ m}\ (3\ \pi^2\ n)^{2/3} \qquad (\sim 5\ eV\ \text{for Cu and Ag})$$

مثـــال (٤ ـ ١١) :

فى نظرية الشريط فى band theory of metal للمواد الصلبة
يقابل الفرد كثيرا جهد دورى يتميز بالشروط الحدية التالية :



عند $(n-1)\ell + \frac{b}{2} < x < n\ell - \frac{b}{2}$ فان $V(x) = 0$

، عند $n\ell - \frac{b}{2} < x < n\ell + \frac{b}{2}$ فان $V(x) = V_o$

حيث $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ ، b هو اتساع الحواجز الجهدية ، a اتساع الفاصل بينها ، $\ell = a + b$

ويمكن وضع حل معادلة شرودنجر باعتبار الفاصل n كما يلى :

$$\psi(x) = A_n\, e^{ik(x-n\ell)} + B_n\, e^{-ik(x-n\ell)}$$

حيث $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ،

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

احسب عناصر الصفوفة الموضحة ووضح انها لاتعتمد على العدد n ثم وضح ان الحلول المقبولة يمكن الحصول عليها فقط عندما يكون

$$|\text{trace } Q| \leq 2$$

ثم استخدم هذه النتيجة لايجاد علاقة يمكن منها الحصول على مدى قيم الطاقة المسموح بها والغير مسموح بها •

الحـــل :

باستخدام شروط الاستمرارية لدوال الحالة نحصل على :

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

حيث

$$Q_{11} = Q_{22}^{*} = e^{ik(l-b)}\left[\cosh Kb - \frac{i\epsilon}{2}\sinh Kb\right]$$

$$Q_{12} = Q_{21}^{*} = -\frac{i\eta}{2}(\sinh Kb)\, e^{ik}$$

وكما رأينا قبلا :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad ; \quad K^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2}$$

بينما

$$\epsilon = \frac{K}{k} - \frac{k}{K} \quad ; \quad \eta = \frac{K}{k} + \frac{k}{K}$$

وبما ان عناصر المصفوفة Q الموضحة لاتعتمد على العدد n اذا يمكننا وضع :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix}$$

والقيم الايجينية للمصفوفة هى جذور المعادلة المميزة :

$$q^2 - q \text{ trace } Q + \det Q = 0$$

وبما ان $\det Q = 1$ فان الجذور تعطى كما يلى :

$$q_{\pm} = \tfrac{1}{2}\left[\text{trace} \pm \sqrt{(\text{trace } Q)^2 - 4}\right]$$

واذا كانت الجذور مختلفة فان زوج المتجهات الايجينية يكونان مستقلين خطيا ويمكـــن وضع

$$\begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_o^{+} \\ B_o^{+} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_o^{-} \\ B_o^{-} \end{pmatrix}$$

حيث $\begin{pmatrix} A_o^+ \\ B_o^+ \end{pmatrix}$ ، $\begin{pmatrix} A_o^- \\ B_o^- \end{pmatrix}$ هما المتجهات الايجينية المقابلة للقيم الايجينية q_+ ، q_- على التوالى • وعلى ذلك :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = q_+^n \begin{pmatrix} A_o^+ \\ B_o^+ \end{pmatrix} + q_-^n \begin{pmatrix} A_o^- \\ B_o^- \end{pmatrix}$$

فاذا كان $|\text{trace } Q| > 2$ فان q_+ ، q_- تكونان حقيقيتـان وأيا من $\lim_{n \to \infty} |q_+^n| \to \infty$ او نهاية $|q_-^n| \to \infty$ ومثل هـــذه الحلول تتعارض مع شرط حسن سلوك دالة الحالة • ولايمكن n ∞ تحقيـــق ذلك الا اذا كان : $|\text{trace } Q| \leq 2$

وحيث ان $\text{trace } Q$ كمية حقيقية فيمكننا تعريف معامل Q بحيث

$$\cos \phi = \tfrac{1}{2} \text{ trace } Q$$

$$(q_- = e^{-i\phi} \;,\; q_+ = e^{+i\phi} \quad \text{وكذلك})$$

$$\cos \phi = \cosh Kb \cos ka + \frac{\epsilon}{2} \sinh Kb \sin ka$$

ومن هذه المعادلة يمكننا الحصول على التركيب الشريطى للتركيب البللورى فى بعـــد واحد فمثلا : فى حالة $E < V_o$ يلاحظ ان جميع قيم الطاقة التى تقابـــل $ka = N\pi$ (حيث N عدد صحيح) غير مسموح بها فيزيائيا او عند حافـــات الشرائط المسموح بها • ومن خاصية استمرارية دوال الحالة نستخلص اذا وجود مـــدى طاقات ذات قيم غير مسموح بها بجانب القيم المحددة المسموح بها تبعا للمعادلـــة اعلاه •

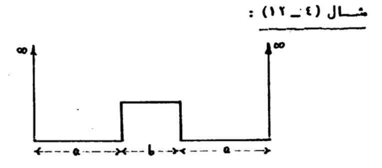
أما فى حالة $E > V_o$ فان شرط القيمة الايجينية يصبح :

$$\cos \phi = \cos k_1 b \cos ka - \frac{k_1^2 + k^2}{2\, kk_1} \sin k_2 b \sin ka$$

حيث $k_1^2 = \frac{2m}{h^2}(E - V_o)$

وبنفس الاسلوب يمكننا تحديد مناطق الطاقة المسموح بها والغير مسموح بها •

مثـــال (٤ ـ ١٢) :



للجهد الموضح بالرسم الذى يتميز بالاتى :

اذا كانت $0 < x < a+b$ $\quad V(x) = V_o$

اذا كانت $0 < x < a \quad a+b < x < (2a+b)$ $\quad V(x) = 0$

اذا كانت $a = x = (2a + b)$ $\quad V(x) = \infty$

اوجد مستويات الطاقة لجسيم يتحرك داخل هذا الجهد بحيث ان طاقتـــــــه E اقل من V_o •

الحـــــل :

حل معادلة شرودنجر الذى يحقق الشروط الحدية بخصوص اختفاء الدالة عند $x = 0$ • $x = (2a+b)$ عبارة عن ؟

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx, & 0 < x < a \quad \text{اذا كانت} \\ B \exp(Kx) + C \exp(-Kx), & a < x < (a+b) \quad \text{اذا كانت} \\ D \sin k(2a+b-x), & a+b < x < 2a+b \quad \text{اذا كانت} \end{cases}$$

حيث

$$k = \sqrt{\frac{2\,mE}{\hbar^2}} \quad , \quad K = \sqrt{\frac{2\,m\,(V_o - E)}{\hbar^2}}$$

وخاصية الاستمرارية لكل من ψ ومشتقتها الاولى $\frac{d\psi}{dx}$ عند الحدود $x = a$ ، $x = a+b$ تعطينا الاربع معادلات التالية بعد التخلص من B ، C :

$$\left(\frac{K}{k} \tan ka + 1\right) e^{Kb} \cdot A = \left(\frac{K}{k} \tan ka - 1\right) D$$

$$\left(\frac{K}{k} \tan ka - 1\right) e^{-Kb} \cdot A = \left(\frac{K}{k} \tan ka + 1\right) D$$

وللحصول على حلول ذات اهمية يجب ان يكون لدينا العلاقة التالية :

$$\left(\frac{K}{k} \tan ka + 1\right) e^{Kb} = \pm \left(\frac{K}{k} \tan ka - 1\right)$$

وهذه المعادلة تعطى مستويات الطاقة الخاصة بالمسألة . فاذا وضعنا $Kb \gg 1$ نجد ان :

$$\tan ka \approx -\frac{k}{K} \mp 2\,\frac{k}{K}\, e^{-Kb}$$

وحيث ان الطرف الايمن لهذه المعادلة عبارة عن كمية صغيرة لأن $K \gg k$ نحصل على التقريب ذي الرتبة الصفرية :

$$\tan k_o a = 0$$

أو

$$k_o a = n\pi$$

$$\therefore \quad E_n^{(o)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m a^2}$$

علاوة على ذلك

$$k \approx \frac{n\pi}{a} - \frac{n\pi/a}{K_o a} \mp \frac{n\pi/a}{K_o a} e^{-k_o b}$$

أو

$$E_n \approx E_n^{(o)} - \frac{2 E_n^{(o)}}{K_o a} \mp 4 \frac{E_n^{(o)}}{a K_o} e^{-k_o b}$$

حيث

$$K_o = \sqrt{\frac{2 m (V_o - E_n^{(o)})}{\hbar^2}}$$

ومعنى ذلك ان مستويات الطاقة يحدث لها انفلاق .

الباب الخامس

المعالجة الكمية للمتذبذب التوافقي البسيط
QUANTUM MECHANICAL TRATMENT OF THE SIMPLE HARMONIC OSCILLATOR



الباب الخامس

المعالجة الكمية للمتذبذب التوافقي البسيط
QUANTUM MECHANICAL TRATMENT OF THE SIMPLE HARMONIC OSCILLATOR

من المعلوم ان اى حركة توافقية بسيطة تتميز بعجلة $\ddot{x}$ تتناسب طرديا مع الازاحة x عن مركز الاتزان وتكون دائما متجهة ناحية هذا المركز • اى انها عكس اتجاه الازاحة • وعلى ذلك فان القوة F المؤثرة على مثل هذا الجسيم الذى يتحرك حركة توافقية بسيطة تعطى بالمعادلة التالية :

شكل (٥ــ١) تمثيل مبسط للمتذبذب التوافقي البسيط •

$$F = -kx \tag{5.1}$$

اى ان

$$m\ddot{x} = -kx$$

$$\ddot{x} = -\frac{k}{m}x = -w^2 x = -\frac{4\pi^2}{T^2} \cdot x \tag{5.2}$$

حيث كما تعلم من الميكانيكا الكلاسيكية :

m هى كتلة الجسيم اى كتلة المتذبذب التوافقي البسيط •

، k ثابت القوة

، w السرعة الزاوية للمتذبذب التوافقي •

، T الزمن الدورى له •

ومثل هذه الحركة تقابلنا كثيرا فى مجالات متعددة مثل :

١ _ حركة الذرات والجزيئات داخل بللورة الحالة الجامدة •

٢ _ حركة الذرات داخل الجزيئات المركبة فى الموائع •

٣ _ حركة الالكترونات فى الذرات •

٤ _ حركة البروتونات والنيوترونات داخل الانوية الذرية •

٥ _ حركة الفوتونات فى المجال الاشعاعى •

والان لو تذكرنا ان طاقة الوضع V مرتبطة بالقوة V بالعلاقـــــة :

$$F = -\text{grad } V$$

اذن للمتذبذب التوافقى البسيط :

$$F = -\frac{dV}{dx} = -kx \qquad (5.3)$$

$$\therefore \quad V(x) = \tfrac{1}{2} kx^2 = \tfrac{1}{2} m w^2 x^2$$

وعلى ذلك فان العاملة الهاميلتونية لمثل هذا المتذبذب التوافقى البسيط تأخـــذ الصورة التالية :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2} m w^2 x^2 \qquad (5.4)$$

اذاً معادلة شرودنجر تصبح فى الصورة البسيطة التالية :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \tfrac{1}{2} m w^2 x^2 \psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$\therefore \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) - \frac{m^2 w^2}{\hbar^2} x^2 \psi(x) = 0 \qquad (5.5)$$

ولكن وحدة الكمية $\frac{m^2 w^2}{\hbar^2}$ هى متر$^{-4}$ • اى ان وحدة الكمية $\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}$ هى $\frac{1}{\text{متر}}$ (اى ان ابعادها $\frac{1}{\text{الطول}}$) •

وعلى ذلك فان حاصل الضرب $x \cdot \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}$ يمثل كمية متغيرة ليــــس لها ابعاد • ولنرمز لها بالرمـز ξ اى ان :

$$\xi = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}} \cdot x \qquad (5.6)$$

وبالتعبير عن معادلة شرودنجر بدلالة هذا المتغير الجديد ξ الذى ليس له ابعاد • ومع ملاحظة ان :

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\,w}{\hbar}} \cdot \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} \qquad (5.7)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{m\,w}{\hbar}\;\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} \qquad (5.8)$$

فاننا نحصل على :

$$\frac{m\,w}{\hbar}\;\frac{d\psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{2\,mE}{\hbar^2}\psi(\xi) - \frac{m\,w}{\hbar}\;\xi^2\psi(\xi) = 0$$

$$\therefore\; \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{2\,E}{\hbar w}\psi(\xi) - \xi^2\psi(\xi) = 0$$

$$\therefore\; \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\,\psi(\xi) = 0 \qquad (5.9)$$

حيث

$$\lambda = \frac{2\,E}{\hbar\,w} \qquad (5.10)$$

والقيم الذاتية اذاً للطاقة مرتبطة بالقيم الذاتية للمعامل λ • وحيث ان $(E \geqslant 0)$ اذاً $(\lambda \geqslant 0)$•

ولكى يسهل علينا الحصول على حل المعادلة (5.9) علينا ان نختبر الدالة $\psi(\xi)$ عندما تقترب قيمة المتغير المستقل ξ الى مالانهاية وفى هذه الحالة فان قيمة $(\lambda - \xi^2)$ توؤل الى $(-\xi^2)$ اى ان معادلة شرودنجر للدالة $\psi_\infty(\xi)$ تختزل الى الصورة التالية :

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2} - \xi^2\psi_\infty = 0 \qquad (5.11)$$

وللحصول على الحل الخطر بيها نعبر بالمتغير η عـن ξ^2 اى ان :

$$\eta = \xi^2 \qquad (5.12)$$

$$\therefore \frac{d^2\psi}{d\xi^2} = 2\frac{d\psi}{d\eta} + 4\xi^2 \frac{d^2\psi}{d\eta^2} \qquad (5.13)$$

وعلى ذلك تصبح (5.11) عندما تقرب ξ من $\pm\infty$:

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\eta^2} - \eta\cdot\psi_\infty = 0$$

ومن خبرتنا فى الباب الرابع (راجع معادلة 4.10) يتضح لنا ان :

$$\psi_\infty = A\, e^{\mp\frac{1}{2}\eta} = A\, e^{\mp\frac{1}{2}\cdot\xi^2}$$

وحيث ان ψ_∞ حسنة السلوك علينا وضع الحل فى الصورة التالية فقط :

$$\psi_\infty = A\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \qquad (5.15)$$

وبذلك نتوقع ان يكون الحل الدقيق لمعادلة (5.9) على الصورة التالية :

$$\psi(\xi) = A\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \qquad (5.16)$$

حيث الدالة $H_n(\xi)$ يمكن التعبير عنها كدالة متعددة الحدود بدلالة المتغير ξ مرفوعا الى رتبة محددة .

معنى ذلك اذاً هو :

$$\frac{d\psi(\xi)}{d\xi} = \left[-A\,\xi\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n + A\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n'(\xi) \right] \qquad (5.17)$$

$$\therefore \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} = \left[A\xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n - A\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n'(\xi) - Ae^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\right.$$

$$+ \left[A e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n''(\xi) - A\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n'(\xi) \right]$$

$$= Ae^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n''(\xi) - 2A\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n'(\xi) + A\xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$$

$$- Ae^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \qquad (5.18)$$

وعلى ذلك يكون ناتج التعويض في معادلة (5.9) هو :

$$Ae^{-\frac{1}{2}\xi^2}\left[\left\{H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\xi^2-1) H_n(\xi)\right\} + (\lambda-\xi^2) H_n(\xi)\right]$$

$$\therefore H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\lambda-1) H_n(\xi) = 0 \qquad (5.19)$$

ولحل هذه المعادلة نفترض ان الدالة $H_n(\xi)$ هى على صورة متسلسلة قوى على الشكل التالى :

$$H_n(\xi) = \sum_{n=o}^{\infty} a_n \cdot \xi^n \qquad (5.20)$$

$$\therefore H_n'(\xi) = \sum_{n=o}^{\infty} n \cdot a_n \cdot \xi^{n-1} \qquad (5.21)$$

$$\therefore H_n''(\xi) = \sum_{n=o}^{\infty} n\cdot(n-1)\cdot a_n \; \xi^{n-2} \qquad (5.22)$$

اذاً بالتعويض من (5.20) ، (5.21) ، (5.22) فى (5.19) نحصل على :

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)\, a_n \;\; ^{n-2} - 2\sum_{n=o}^{\infty} na_n\, \xi^{n-1} + (\;\;-1)\sum_{n=o}^{\infty} a_n\, \xi^n = 0$$

$$(5.23)$$

مع ملاحظة ان المتسلسلة الاولى فى تلك المعادلة يتلاشى فيها الحدين الاوليـــــن
$n=0$ ، $n=1$ لذلك فهى تبدأ من $n=2$ • وعلى ذلك يمكننا اعادة كتابـــة
(5.23) مع استبدال n فى المتسلسلة الاولى بالقيمة $(n+2)$ وعلى ذلك :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (n+2)(n+1)\, a_{n+2} - 2\, n\, a_n + (\lambda - 1)\, a_n \right\} \xi^n = 0 \qquad (5.24)$$

والمفروض ان هذه المعادلة صحيحة لجميع قيم ξ وهذا لايتحقق الا اذا كـــان
كل من المعاملات على حدة للمتغير ξ مرفوعا لاى رتبة n يساوى صفرا • وهـذا
يعنى ان :

$$\left[(n+2)(n+1)\, a_{n+2} - (2n+1) - \lambda \right] a_n = 0 \qquad (5.25)$$

$$\therefore \quad a_{n+2} = \frac{(2n+1) - \lambda}{(n+2)\ (n+1)}\, a_n \qquad (5.26)$$

وهذه العلاقة نستطيع بواسطتها حساب اى من المعاملات a_n فى المعادلة (5.20)
بدلالة المعامل الذى يسبقه a_{n-2} •

وحيث ان دالة الموجه حسنة السلوك لذلك يجب ان تنتهى تلك المتسلسلـــة
(5.20) عند رتبة معينة وليكن الحد المقابل هو المحتوى على a_n وهذا يعنـى
وضع المعامل a_{n+2} مساويا للصفر وعليه فانه بالتعويض بذلك فى المعادلة (5.26)
نحصل على :

$$(2n+1) - \lambda = 0 \qquad (5.27)$$

حيث ان a_n لاتساوى صفرا •

$$\therefore \quad \lambda = 2n+1 \qquad (5.28)$$

وعلى ذلك فالمعادلة (5.19) بعد التعويض فيها عن λ من المعادلـــة
(5.28) تأخذ الصورة التالية :

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0 \qquad (5.29)$$

وتسمى معادلة هيرميت التفاضلية •

وحيث ان λ مرتبط بالطاقة E للمتذبذب التوافقي تبعا للعلاقة

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar w} \qquad (5.10)$$

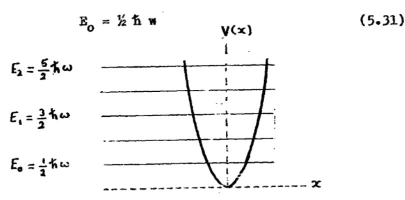
$$\therefore \quad \frac{2E}{\hbar w} = (2n + 1)$$

$$\therefore \quad E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar w \qquad (5.30)$$

وهذه المعادلة تعطى القيم الايجينية لطاقة المتذبذب التوافقـــــــــــــــى
• Energy Eigenvalues of the Harmonic Oscillator

ولقد رمزنا لمستويات الطاقة المختلفة للمتذبذب التوافقي بالرمز E_n تعبيـــرا عن انها تعتمد اساسا على عدد الكم n • ونلاحظ ان تلك المستويات تنفصل عـــن بعضها بقيم ثابتة هي $\hbar w$ • ونلاحظ ان اقل مستوى طاقة لايساوى صفرا كما هـــو الحال في الميكانيكا الكلاسيكية ولكنه يساوى :

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar w \qquad (5.31)$$



شكل (٥_٢) رسم يوضح دالة الجهد للمتذبذب التوافقي البسيط بثلاث مستويـــات الاولى للطاقة •

وهى فى الحقيقة مرتبطة اولازمة من لوازم مبدأ اللاتحديد • وقد ادت الى شرح العديد من الظواهر الفيزيائية الخاصة بالحالة الصلبة للمادة وسلوك الغازات السائلة عند درجات الحرارة المنخفضة جدا •

اما بالنسبة لدالة الحالة $\psi(x)$:

$$\psi(x) = A\, H_n\left(\sqrt{\frac{m w}{\hbar}}\, .\, x\right) e^{-\frac{mw}{\hbar} . x^2}$$

فان كثير الحدود $H_n\left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, .\, x\right)$ الذى يحقق المعادلة (5.30) يسمى كثير الحدود لهيرميت (Hermite Polynomial) ويُعرّف على الصورة التالية (للسهولة يعبر عنه بدلالة المتغير المستقل ξ) :

$$H_n(\xi) = (-1)^n \; e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \; e^{-\xi^2} \qquad (5.33)$$

كما انه يحقق العلاقات الرياضية التالية :

$$i)\quad H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n\, H_{n-1}(\xi) \qquad (5.34)$$

$$ii)\quad H_n'(\xi) = 2n\, H_{n-1}(\xi) \qquad (5.35)$$

$$iii)\quad \int_{-\infty}^{\infty} (e^{-\frac{1}{2}\xi^2})^2\, H_m^*(\xi)\, H_n(\xi)\, d\xi = 2^n\, n! \sqrt{\pi}\, \delta_{mn} \qquad (5.36)$$

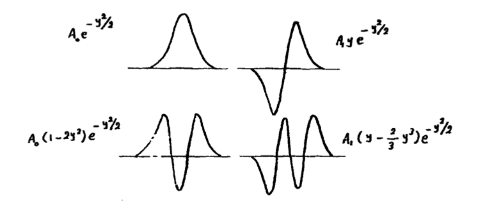
وهذه العلاقة الاخيرة يمكننا كتابتها بدلالة المتغير المستقل x على الصورة التالية :

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mw}{\hbar} x^2}\, H_m^*(x)\, H_n(x)\, dx = \frac{2^n\, n! \sqrt{\pi}}{\frac{mw}{\hbar}}\; \delta_{mn} \qquad (5.37)$$

وفيما يلى بعض قيم $H_n(\xi)$:

$$
\left.
\begin{aligned}
H_o &= 1 \\
H_1 &= 2\,\xi \\
H_2 &= 4\,\xi^2 - 1 \\
H_3 &= 8\,\xi^3 - 12\,\xi \\
H_4 &= 16\,\xi^4 - 48\,\xi^2 + 12 \\
H_5 &= 32\,\xi^5 - 160\,\xi^3 + 120\,\xi
\end{aligned}
\right\} \quad (5.38)
$$

يوضح شكل (٥ـ٢) المستويات الثلاث الاولى للطاقة بينما شكل (٥ـ٣) يوضح الدوال الاربعة الدوال الذاتية الاولى لمتذبذب توافقي بسيط ، يلاحظ مايلى من هذين الشكلين



شكل (٥ـ٣) رسم يوضح الاربع دوال الاولى للمتذبذب التوافقي البسيط .

١ ـ كما اشرنا من قبل فان الخطوط الافقية التى تمثل مستويات الطاقة متساوية التباعد بينها وبين بعضها لان كل مستويين متتاليين يفصلهما المقدار $\hbar w$.

٢ ـ ان النقطتين المثلتين لتلاقى القطع المكافئ* الممثل لطاقة الوضع $V = \frac{1}{2} mw^2 x^2$ مع الخط الافقى الذى تتبعه الدالة الذاتية $\psi_0 (x)$ (هذا الخط يمثل مستوى الطاقة E_0) هما $x = \pm x_0$ ونحصل عليها من الشرط $E_0 = \frac{1}{2} \hbar w = \frac{1}{2} mw^2 x_0^2$ وعندهما طاقة الحركة تساوى صفرا .

٣ ـ تتبادل الدوال الذاتية مابين كونها متماثلة (Symmetric) او غير متماثلة (Antisymmetric) .

٤ ـ بالنسبة للدالة الذاتية ψ_0 نلاحظ ان لها قيمة محددة خارج المدى $(-x_0 < x < x_0)$ حيث الطاقة الكلية تكون اصغر من طاقة الوضع V اى ان طاقة الحركة تكون سالبة . وهذا معناه احتمال محدد لتواجد الجسيم فى المنطقة التى فيها تكون طاقة حركته سالبة . وهذا السلوك شائع فى ميكانيكا الكم .

والان بالاستفادة من خاصية المعايرة لدالة الحالة $\psi(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* (x) \psi_n(x)\, dx = \delta_{mn}$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \left[A\, H_m\left(\sqrt{\frac{mw}{h}}\, x\right) e^{-\frac{mw}{2\hbar} x^2} \right]^* \left[A H_n\left(\sqrt{\frac{mw}{h}}\, x\right) e^{-\frac{mw}{2\hbar} x^2} \right] dx$$

$$= A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mw}{\hbar} x^2} H_m\left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, x\right) H_n\left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, x\right) dx$$

$$= A_n^2 \frac{\pi^{1/2}\, 2^n\, n!}{\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}} = 1$$

$$\therefore \quad A_n = \sqrt{\frac{\left(\frac{mw}{\hbar}\right)^{1/2}}{\pi^{1/2}\, 2^n\, n!}} \qquad (5.39)$$

مثـــال (٥ـ١) :

وضح انه بالنسبة للمتذبذب التوافقي البسيط في الحالة الادنى الارضيه لـــــه فان احتمال تواجد الجسيم المتذبذب خارج الحدود الكلاسيكية هى تقريبا ٠,١٦

الحـــــل :

نعلم ان الحالة الارضية للمتذبذب التوافقي البسيط يتميز بطاقة مقدارهـــــــا $E = \frac{1}{2}\hbar w$ •

وتبعا للفيزياء الكلاسيكية فان الطاقة الكلية E للمتذبذب الذى يتحــــرك بسعة ذبذبة a هى :

$$E = \frac{1}{2} m w^2 a^2$$

اذاً السعة a التي تقابل طاقة $E = \hbar w$ هى :

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}$$

وبما ان المتغير $\xi = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, x$ ، اذاً عندما تكون $x = \pm a$ فــان ξ تأخذ القيم ± 1 كما رأينا قبلا ٠

∴ الاحتمالية ان يكون الجسيم المتذبذب خارج نطاق $\xi = \pm 1$ هى :

$$W = \frac{\int_{1}^{\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi}{\int_{0}^{\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi} \qquad 0.16$$

مثـال (٥ ـ ٢) :

اذا كانت طاقة الوضع لمتذبذب توافقى فى ثلاث ابعاد عبارة عن

$$V = \tfrac{1}{2}\, m\, (w_1^2\, x^2 + w_2^2\, y^2 + w_3^2\, z^2)$$

عيّن مستويات الطاقة والدوال الموجية المعايرة المقابلة لها ٠

الحــــل :

يمكننا جعل نظرية المتذبذب التوافقى البسيط (ذى البعد الواحد) بحيــث تشمل حالة التذبذب فى ثلاث ابعاد وذلك بالبدء بمعادلة شرودنجر بالصورة التالية :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi\,(x,y,z) + \left[\tfrac{1}{2}\, m \;\; w_1^2x^2 + w_2^2y^2 + w_3^2z^2\right]\psi \;=\; E$$

وحلها بطريقة فصل المتغيرات على اساس ان الدالة ψ يفترض انها بالصورة التالية :

$$\psi\,(x,y,z) = X(x)\;Y(y)\;Z(z)$$

وبالتعويض عنها فى معادلة شرودنجر نجد ان :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2}+\tfrac{1}{2}m\,w_1^2\,x^2\right]$$

$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy^2}+\tfrac{1}{2}m\,w_2^2\,y^2\right]$$

$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}+\tfrac{1}{2}m\,w_3^2\,z^2\right] = E$$

وعليه فان :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2}+\tfrac{1}{2}m\,w_1^2\,x^2 = E_1 \qquad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy^2}+\tfrac{1}{2}m\,w_2^2\,y^2 = E_2 \qquad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z}{dz^2}+\tfrac{1}{2}m\,w_3^2\,z^2 = E_3 \qquad (3)$$

حيث

$$E_1 + E_2 + E_3 = E$$

وكل من معادلات (1) و (2) و (3) ماهي الا معادلة متذبـــذب توافقي بسيط وقد رأينا ان دواله الموجية المعايرة هي :

$$\psi_n(r) = N_n\, e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}\, H_n(\alpha r)$$

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\; 2^n\; n!}} \quad , \quad \xi = \alpha r = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, r$$

بناء عليه الحلول المحددة التي يمكن الوصول اليها هي المقابلة لكل من :

$$E_1 = (n_1 + \tfrac{1}{2})\, \hbar w_1 \quad ; \quad n_1 = 0, 1, 2, \ldots$$

$$E_2 = (n_2 + \tfrac{1}{2})\, \hbar w_2 \quad ; \quad n_2 = 0, 1, 2, \ldots$$

$$E_3 = (n_3 + \tfrac{1}{2})\, \hbar w_3 \quad ; \quad n_3 = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\therefore\ E = (n_1 + \tfrac{1}{2})\, \hbar w_1 + (n_2 + \tfrac{1}{2})\, \hbar w_2 + (n_3 + \tfrac{1}{2})\, \hbar w_3$$

والدوال المعايرة المقابلة هى :

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3} = \left[\frac{1}{2^n\ n_1!\ n_2!\ n_3!\ \pi^{3/2}} \right]^{\frac{1}{2}} H_{n_1}(\xi)\ H_{n_2}(\eta)\ H_{n_3}(S)\ e^{-\frac{\rho^2}{2}}$$

حيث

$$n = n_1 + n_2 + n_3$$

$$\xi = \sqrt{\frac{mw_1}{h}}\, x \quad ; \quad \eta = \sqrt{\frac{mw_2}{h}}\, y \quad ; \quad S = \sqrt{\frac{mw_3}{h}}\, z$$

$$\rho^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2$$

وفى الحالة الخاصة التى يتميز فيها المتذبذب التوافقى بالتجانس فـــــان $w_1 = w_2 = w_3 = w$ وعلى هذا فان القيم الايجينية تكون :

$$E_{n_1 n_2 n_3} = (n + \tfrac{3}{2})\, \hbar w$$

حيث $n = n_1 + n_2 + n_3$

ويمكننا حساب درجة الانحلال degree of degeneracy لأى مستوى طاقـــة عدد أنكم له n بملاحظة انه اذا كان n_1 هى الاخرى معلومة فان العدديـــن n_2 و n_3 تأخذ القيم :

$$(0,\ n-n_1);\ (1,\ n-n_1-1);\ (2,\ n-n_1-2);\ldots,\ (n-n_1, 0)$$

وعلى ذلك يكون هناك عدد من الحالات يساوى $(n - n_1 + 1)$ ولكن n_1 يمكن ايضا ان تأخذ اى قيمة بين $(0, n)$ وعليه فان درجة الانحلال تكون :

$$(n+1) + n + (n-1) + (n-2) \dots + 1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

الباب السادس

المعالجة الكمية لجسيم يتحرك فى مجال قوة مركزية
(مجموعات شبيهة ذرة الايدروجين)

Quantum Mechanical Treatment of the Motion of a Particle in a Central-Force Field
(Hydrogen-Atom-Like Systems)

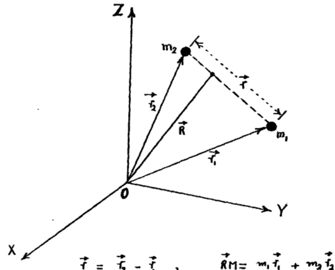
الباب السادس

المعالجة الكمية لجسيم يتحرك فى مجال قوة مركزية
(مجموعات شبيهة ذرة الايدروجين)
Quantum Mechanical Treatment of the Motion of a Particle in a Central-Force Field
(Hydrogen-Atom-Like Systems)

نود فى هذا الباب معالجة حركة جسيم يتحرك تحت تأثير قوة جذب مركزيـــــة مثل القوة الكولومية التى بين شحنة الالكترون $(-e)$ وشحنة نواه ذرته الام $(+Ze)$ حيث كالمعتاد Z هو العدد الذرى للنواه • هذه المركزية تقابل طاقــــة جهد مركزية ولتكن $V(r)$ • حيث

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{Ze.e}{r} \tag{6.1}$$

ويتضح من ذلك ان $V(r)$ تعتمد فقط على البعد النسبى بين الجسيمين وهذا



$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad , \qquad \vec{R}M = m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2$$

شكل (٦ــ١) رسم يوضح اختزال حركتى الجسيمين m_1 ، m_2 الى حركة جسم مفرد كتلته u بانه يبانها طاقة جهد مركزية • كما ان الهاميلتونية لهذه المجموعة تأخـــذ الصورة التالية :

$$H = \frac{p_1^2}{2\,m_1} + \frac{p_2^2}{2\,m_2} + V(r) \qquad (6.2)$$

حيث يمثل الحد الاول طاقة الحركة لاحد الجسيمين وليكن الالكترون مثلا • ويمثل الحد الثانى طاقة الحركة للجسيم الآخر وليكن البروتون • اما $V(r)$ فتمثل طاقة الجهد الكولومى بين شحنتيهما • ونلاحظ ان البعد بين الجسيمين r عبارة عن :

$$r = \sqrt{(x_1-x_2)^2 + (y_1-y_2)^2 + (z_1-z_2)^2} \qquad (6.3)$$

وعلى ذلك تكون العاملة الهاميلتونية لتلك المجموعة الفيزيائية هى :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\,m_2}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r} \qquad (6.4)$$

وتكون معادلة شرودنجر لهذه المجموعة كما يلى :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\,m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\,m_2}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o r}\right]\psi(r_1,r_2)$$
$$= E_{total}\,\psi(r_1,r_2) \qquad (6.5)$$

وحيث ان هذه المعادلة تعتمد على ست متغيرات ومن الصعب معالجتها لذا تُحول هذه المعادلة الى معادلتين احداهما تمثل حركة جسيم واحد مكافئ • هو مركز الكتلة (Centre of mass) للمجموعة والاخرى تمثل الحركة النسبية بين الجسيمين • ويتم ذلك باختيار احداثيين هما $\vec{R}$ ، $\vec{r}$ • حيث $\vec{R}$ هو احداثى مركز الكتلة ويعرف على النحو التالى :

$$\vec{R}\,(m_1 + m_2) = \vec{R}M = m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2$$

$$XM = m_1x_1 + m_2x_2$$

$$YM = m_1y_1 + m_2y_2 \qquad (6.6)$$

$$ZM = m_1z_1 + m_2z_2$$

بينما r سبق تعريف بالمعادلة (6.2) •
وبتحويل المعادلة (6.5) بدلالة تلك الاحداثيات نحصل على :

$$\left[- \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(r) \right] \psi(r,R) = E_{total} \; \psi(r,R)$$

$$= E_{total} \left(\Omega(R) \cdot U(r) \right) \qquad (6.7)$$

حيث μ هى الكتلة المختزلة (reduced mass) وتعرّف كالمعتاد كمايلى :

$$\mu = \left[\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right]^{-1} = \frac{m_1 \, m_2}{m_1 + m_2} \qquad (6.8)$$

بينما الطاقة الكلية E_{total} هى فى هذه الحالة مجموع الطاقة الكلية لمركز الكتلــــة E_c والطاقة الكلية المرتبطة بالحركة النسبية E اى ان :

$$E_{total} = E_c + E \qquad (6.9)$$

وبتطبيق طريقة فصل المتغيرات كما سبق ان درسنا (انظر صفحة ٧١) نحصـــل على المعادلتين التاليتين :

$$- \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right) \Omega(R) = E_c \, \Omega(R) \qquad (6.10)$$

$$- \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) U(r) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \, r} U(r) = E \, u(r)$$

$$(6.11)$$

واضح ان المعادلة (6.10) تمثل موجه مستوية مصاحبة لحركة جسيم حر كتلتـــه M ولذلك يبقى لدينا التركيز على المعادلة (6.11) للحركة النسبية والتى تمثل حركـــة جسيم كتلته μ فى مجال يتميز بطاقة جهد V(r) وعلينا اذا استنتاج مستويـات الطاقة E المرتبطة بتلك الحركة النسبية :

بما ان هذه الحركة التى تمثلها المعادلة (6.11) هى حركة تحت تاثيــــر قوة مركزية وفيها طاقة الجهد $V(r)$ هى دالة فقط للمتغير r فانه من المناســـب التعبير عن عاملة اللابلاسيان فيها بدلالة المتغيرات (r, θ, ϕ) اى الاحداثيات الكريه والتى يمكننا بعد ذلك فصلها عن بعضها لان $V(r)$ تتميز بتماثل كـــــرى وذلك باتباع طريقة فصل المتغيرات السابق لنا دراستها • اى ان :

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$U(r,\theta,\phi) \quad - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 \; r} \right] U(r,\theta,\phi) \qquad (6.12)$$

وكما اشرنا من قبل بما ان طاقة الجهد $\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ – تتميز بتماثل كرى لذا يمكننـــا فصل المتغيرات (r, θ, ϕ) فى معادلة (6.12) كما يلى :

نضع الدالة $U (r, \theta, \phi)$ على الصورة التالية :

$$U(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta,\phi) \qquad (6.13)$$

$$\therefore \; Y(\theta,\phi) \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{R(r)}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) Y(\theta,\phi)$$

$$+ R(r) \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta,\phi)$$

$$+ \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 \; r} \right] R(r) \; Y(\theta,\phi) = 0 \qquad (6.14)$$

وبتسمة هذه المعادلة على : $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\, Y(\theta, \phi)$

نحصل على

$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R(r) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right] =$$

$$= - \frac{1}{\sin\theta\, Y(\theta,\phi)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) Y(\theta,\phi)$$

$$- \frac{1}{Y(\theta,\phi) \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta,\phi) \qquad (6.15)$$

وفيها نلاحظ ان الطرف الايمن دالة في المتغيرين θ, ϕ بينما الطرف الايسر دالـــة فقط للمتغير r وعلى ذلك فانها لاتتحقق لجميع قيم المتغيـــرات r, θ, ϕ الا اذا كان كل طرف منها على حدة يساوى ثابتا مشتركا لايعتمد على اى من تلـــك المتغيرات • ولنرمز له بالرمز λ

$$\therefore \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) R(r) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right] = \qquad (6.16)$$

$$- \frac{1}{\sin\theta\, Y(\theta,\phi)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) Y(\theta,\phi)$$

$$- \frac{1}{Y(\theta,\phi) \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta,\phi) = \qquad (6.17)$$

ومرة اخرى بالتعبير عن الدالة $Y(\theta,\phi)$ على انها حاصل ضرب دالتين اخريتيـــن $\Phi(\phi)$ ، $\Theta(\theta)$ اى ان :

$$Y(\theta,\phi) = \Phi(\phi) \cdot \Theta(\theta) \qquad (6.18)$$

نحصل على المعادلة :

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\Theta(\theta) + \lambda\,.\,\sin\theta$$

$$= -\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Phi(\phi) \qquad (6.19)$$

حيث الطرف الايمن فيها دالة فقط للمتغير ϕ بينما الطرف الايسر دالة فقط للمتغير θ . وعلى هذا فكل منهما يساوى ثابتا مشتركا آخر وليكن β فنحصل على :

$$-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi(\phi) = \beta \qquad (6.20)$$

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\Theta(\theta) + \lambda\sin^2\theta = \beta \qquad (6.21)$$

ونلاحظ ان المعادلة $(6-20)$ باعادة ترتيبها كما يلى :

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + \beta\,\Phi(\phi) = 0$$

يتضح ان الحل العام لها هو

$$\Phi(\phi) = C\,e^{\pm i\sqrt{\beta}\,\phi}$$

$$= C\,e^{\pm im\phi} \qquad (6.22)$$

حيث

$$m = \sqrt{\beta} \qquad (6.23)$$

وحيث ان الدالة $\Phi(\phi)$ يجب ان تكون وحيدة القيمة • كما ان من خصائصهـــا ان تعيد قيمتها عندما تزداد الزاوية ϕ بمقدار 2π بمعنى ان :

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) \qquad (6.24)$$

فان ذلك معناه

$$C\, e^{im\phi} = C\, e^{im(\phi+2\pi)} = C\, e^{im\phi} \cdot e^{im(2\pi)}$$

$$\therefore \quad 1 = e^{im(2\pi)} = \cos m\,(2\pi) + i \sin m\,(2\pi)$$

$$\therefore \quad 1 = \cos m\,(2\pi) \qquad (6.25)$$

$$\therefore \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \qquad (6.26)$$

$$\therefore \quad \Phi(\phi) = C\, e^{\pm im\phi} \qquad (6.27)$$

وقد سبق ان درسنا مثال (٣-٧ مثلا) ان العاملة التى تقابل المركبة L_z كمتجـــه كمية الحركة الدورانية L عبارة عن :

$$\hat{L}_z = i\,\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \qquad (6.28)$$

فاذا أثرنا بتلك العاملة على الدالة (6.27) نحصل على :

$$\hat{L}_z\, \Phi(\phi) = i\,\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}\left(C\, e^{\pm im\phi}\right)$$

$$\therefore \quad \hat{L}_z\, \Phi(\phi) = \pm\, \hbar\, m\, \Phi \qquad (6.29)$$

هذه المعادلة الايجينيه توضح ان الدالة Φ هى دالة خاصة للعاملة $\hat{L}_z$ تقابل القيم الذاتية $\pm \hbar\, m$ ويسمى الرقم m بعدد الكم المغناطيسى للحركة المداريـــة Orbital Magnetic Quantum Number الذى يتميز بانه مساوٍ لاعداد صحيحـــه

فقط كما هو موضح فى معادلة (6.26) • وسبب هذه التسمية انه شوهد بالتجربة انفصال مستويات الطاقة المرتبطه بحركة الالكترونات المدارية فى ذراتها عندما تكون تلك الذرات تحت تأثير مجال مغناطيسى خارجى واصطلح على ان يكون اتجاهه موازيا للاحداثى Z •

وهنا يبقى ايجاد قيمة الثابت C فى المعادلة (6.27) ويتم ذلك باستخدام خاصية المعايرة للدالة Φ كما يلى :

$$\therefore \int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi \, d\phi = 1$$

$$\therefore \int_0^{2\pi} \left[C e^{-im\phi} \right]^* \cdot \left[C e^{-im\phi} \right] d\phi = 1$$

$$\therefore \left| C \right|^2 \cdot 2\pi = 1$$

$$\therefore C = \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\therefore \Phi(\phi) = \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\phi} \qquad (6.30)$$

والآن باستخدام النتيجة (6.23) يمكن كتابة المعادلة (6.21) على النحو التالى :

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) \Theta(\theta) + \lambda \sin^2\theta = \beta = m^2 \qquad (6.31)$$

وباعادة ترتيب تلك المعادلة نحصل على :

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta}\right) \Theta(\theta) + \left[\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right] \Theta(\theta) = 0 \qquad (6.32)$$

ويمكن تبسيط هذه المعادلة بوضع $\cos \Theta = \mu$
وبمعنى آخر يكون لدينا دالة جديدة P للمتغير μ بحيث :

$$P(\mu) = \Theta(\theta) \qquad (6.33)$$

وفى نفس الوقت

$$\sin \Theta = \sqrt{1 - \mu^2} \qquad (6.34)$$

كما ان :

$$\frac{d\mu}{d\Theta} = - \sqrt{1 - \mu^2} \qquad (6.35)$$

$$, \quad \frac{d}{d\Theta} = \frac{d}{d\mu} \frac{d\mu}{d\Theta} = - \sqrt{1 - \mu^2} \frac{d}{d\mu} \qquad (6.36)$$

وعلى ذلك تختزل معادلة (6.32) للصورة التالية :

$$\frac{d}{d\mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{d}{d\mu} \right] P(\mu) + \left[\lambda - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] P(\mu) = 0$$

أى ان :

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2}{d\mu^2} P(\mu) - 2\mu \frac{d}{d\mu} P(\mu) + \left[\lambda - \frac{m^2}{1 - \mu^2} \right] P(\mu) = 0 \qquad (6.37)$$

مع ملاحظة ان قيمة المتغير المستقل μ تتغير بين القيمتين $+1$ ، -1 .
ونريد الآن ايجاد حلول لهذه المعادلة (6.37) بشرط ان تكون وحيدة القيمـــة ، ومتصلة ، وذات قيم محددة مع امكانية معايرتها . وباتباع الطرق القياسية الرياضيـــة فان ذلك يتم بالتعبير عن الدالة $P(\mu)$ على صورة متسلسلة قوى مع مراعاة ان لهـــا نقطتين شاذتين (مفردتين) Two Singular Points عند $\mu_0 = \pm 1$.

وبادخال المتغير المستقل ϵ بدلا من المتغير μ على الصورة :

$$\epsilon = (1 - \mu^2) \qquad (6.38)$$

فان النقط المفردة $\mu_o = \pm 1$ تقابل $\epsilon_o = 0$ وعلى ذلك فان متسلسلة القوى الخاصة بالدالة $P(\mu)$:

$$P(\mu) = \left| (\mu - \mu_o) \right| \sum_{n=o}^{\infty} a_n (\mu - \mu_o)^n \qquad (6.39)$$

يمكن استبدالها بمتسلسلة قوى بدلالة المتغير ϵ على الصورة التالية :

$$F(\epsilon) = (\epsilon - \epsilon_o)^r \sum_{n=o}^{\infty} a_n (\epsilon - \epsilon_o)^n \qquad (6.40)$$

وحيث ان $\epsilon_o = 0$ فان الحل يكتب على الصورة الاتية :

$$F(\epsilon) = \epsilon^r \sum_{n=o}^{\infty} a_n \epsilon^n = \sum_{n=o}^{\infty} a_n \epsilon^{n+r} \qquad (6.41)$$

وعلى ذلك :

$$\frac{dF}{d\epsilon} = \sum_{n=o}^{\infty} a_n (n + r) \epsilon^{n+r-1} \qquad (6.42)$$

$$\frac{d^2F}{d\epsilon^2} = \sum_{n=o}^{\infty} a_n (n + r)(n + r - 1) \epsilon^{n+r-2} \qquad (6.43)$$

وحيث ان :

$$\frac{d}{d\mu} = \frac{d\epsilon}{d\mu}\frac{d}{d\epsilon} = -2\mu \frac{d}{d\epsilon} = \mp 2\sqrt{1-\epsilon}\ \frac{d}{d\epsilon} \qquad (6.44)$$

$$\text{،} \quad \frac{d^2}{d\mu^2} = -2\frac{d}{d\epsilon} + 4(1-\epsilon)\frac{d^2}{d\epsilon^2} \qquad (6.45)$$

تصبح المعادلة (6.37) على الصورة التالية :

$$\epsilon \left[4\ (1-\epsilon)\frac{d^2}{d\epsilon^2} - 2\frac{d}{d\epsilon}\right] F(\epsilon) - 2 \quad 1-\epsilon\ (-2 \quad 1-\epsilon \frac{d}{d\epsilon}) F(\epsilon)$$

$$+ \left[\lambda - \frac{m^2}{\epsilon} \right] F(\epsilon) = 0 \qquad (6.46)$$

$$4\epsilon\ (1-\epsilon)\frac{d^2}{d\epsilon^2} F(\epsilon) - 2\epsilon \frac{dF(\epsilon)}{d\epsilon} + 4\ (1-\epsilon)\frac{dF(\epsilon)}{d\epsilon}$$

$$+ \left[\lambda - \frac{m^2}{\epsilon} \right] F(\epsilon) = 0 \qquad (6.47)$$

$$\therefore\ 4\epsilon\ (1-\epsilon)\frac{d^2}{d\epsilon^2} F(\epsilon) + \left\{ 4 - 6\epsilon \right\} \frac{dF(\epsilon)}{d\epsilon} + \left[\lambda - \frac{m^2}{\epsilon} \right] F(\epsilon) = 0 \qquad (6.48)$$

وبالتعويض في (6.48) من (6.41) ، (6.42) ، (6.43) وبتجميع معاملات القوى المتساوية للمتغير ϵ نحصل على :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ 4(n+r)\ (n+r-1) + 4(n+r) - m^2 \right\} a_n\ \epsilon^{n+r-1}$$

$$+ \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \lambda - 4(n+r)\ (n+r-1) - 6(n+r) \right\} a_n\ \epsilon^{n+r} = 0 \qquad (6.49)$$

بمساواة معامل المتغير المرفوع لاصغر قوة وهى $(r-1)$ بالصفر نحصل على :

$$\left\{ 4\ r\ (r-1) + 4\ r - m^2 \right\} a_o = 0 \qquad (6.50)$$

وحيث ان a_o لاتساوى صفرا فان :

$$4\ r\ (r-1) + 4\ r - m^2 = 0$$

$$\therefore\ r = ½\ |m| \qquad (6.51)$$

بينما اذا اردنا مساواة معامل ϵ^{n+r} بالصفر فيجب اولا ان نستبدل فى المتسلسلة الاولى من المعادلة (4.49) كل n بالقيمة (n+1) وعلى ذلك نحصل على :

$$\sum \left\{ 4\ (n+1+r)\ (n+r) + 4\ (n+1+r) - m^2 \right\} a_{n+1}\ \epsilon^{n+r}$$

$$+ \sum \left\{ \lambda - 4\ (n+r)\ (n+r-1) - 6\ (n+r) \right\} a_n\, \epsilon^{n+r} = 0 \qquad (6.52)$$

$$\therefore\ a_{n+1} = \frac{4\ (n+r)\ (n+r-1) + 6(n+r) - \lambda}{4\ (n+r+1)\ (n+r) + 4\ (n+r+1) - m^2} \cdot a_n \qquad (6.53)$$

وحيث ان الدالة $F(\epsilon)$ يجب ان تكون حسنة السلوك وذات قيمة محدودة فمعنى ذلك ان المتسلسلة يجب ان تنتهى عند حد معين وليكن الحد الذى فيه المعامل a_n ومعنى ذلك بالتالى ان المعامل a_{n+1} يجب ان يساوى صفر وهذا معناه :

$$4\ (n+r) \left[(n+r) - 1 + 6\ (n+r) \right] - \lambda = 0$$

$$\therefore\ \lambda = 4\ (n+r)^2 + 2\ (n+r)$$

$$= 2\ (n+r) \left\{ 2\ (n+r) + 1 \right\}$$

$$= (2n + 2r) \left\{ (2n + 2r) + 1 \right\}$$

$$= (n' + m)\ (\ (n' + m) + 1)$$

$$\therefore\ \lambda = \ell\,(\ell + 1)$$

حيث

$$\ell = n' + |m|$$

مع مراعاة ان

$$n' = 0, 2, 4, 6, \dots$$

بينما

$$|m| = 0, 1, 2, 3, \dots$$

أى ان

$$\ell = n' + m = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

وحيث ان

$$|m| = \ell - n'$$

اذاً اكبر قيمة $|m|$ هى التى تقابل n' تساوى صفرا ٠ اى ان اكبر قيمـــة m هى $\pm\ell$ ٠

$$\therefore \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm\ell \qquad (6.54)$$

أى ان لعدد الكم المغناطيسى قيما عددها $(2\ell + 1)$ قيمه ممكنه وبالتعويض عـــن $r = \frac{1}{2}|m|$ ، ϵ فى المعادلة (6.41) نجد ان :

$$F(\epsilon) = (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}|m|} \sum a_n (1 - \mu^2)^n$$

$$= (1 - \mu^2)^{\frac{1}{2}|m|} B(\mu) \qquad (6.55)$$

وعلى ذلك تصبح المعادلة (6.37) على الصورة الاتية :

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2B(\mu)}{d\mu^2} - 2(|m| + 1)\mu \frac{dB(\mu)}{d\mu}$$

$$+ \left[\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)\right] B(\mu) = 0 \qquad (6.56)$$

وهذه هى معادلة لِجَنْدِر المرتبطـــة Legendre's Associated Equation
وتبعا للظروف القياسية لمعالجتها فان حلول هذه المعادلة هى ماتسمى بدوال لجنـــدر المرتبطة Associated Legendre's Functions وتأخذ الصورة التالية :

$$P_{\ell}^{|m|}(\mu) = (1-\mu^2)^{\frac{1}{2}|m|} \frac{d^{|m|}}{d\mu^{|m|}} P_{\ell}(\mu) \qquad (6.57)$$

حيث $P_{\ell}(\mu)$ تقابل الحالة الخاصة التى فيها $m = 0$ وعندئذ تسمى هذه الدالة $P_{\ell}^{0}(\mu)$ بدالة لجندر العادية • وعلى ذلك فان الدالة المشتركة للمتغيرين Θ و ϕ اى $Y(\Theta, \phi)$ هى :

$$Y(\Theta,\phi) = Y_{\ell m}(\Theta, \phi) = N_{\ell m} P_{\ell}^{m}(\cos\Theta)\, \Phi_m(\phi)$$

$$= N_{\ell m} P_{\ell}^{m}(\cos\Theta) \cdot \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (6.58)$$

حيث $N_{\ell m}$ هو ثابت المعايرة للدالة Normalization Factor ونحصل عليه من شرط المعايرة وخاصية التعامدية :

$$\int_{1}^{-1}\int_{\phi=0}^{2\pi} Y_{\ell' m'}(\Theta,\phi)\, Y_{\ell m}\, d(\cos\Theta)\, d\phi$$

$$= \int_{\Theta=0}^{\pi}\int_{\phi=0}^{2\pi} Y^{*}_{\ell' m'}(\Theta,\phi)\, Y_{\ell m}(\Theta,\phi)\,(-\sin\Theta\, d\Theta)\, d\phi$$

$$= \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} = 1 \qquad \text{if} \quad \ell = \ell' \quad , m = m'$$

$$= 0 \qquad \text{if} \quad \ell \neq \ell' \ \text{or}\ m \neq m'$$

وهذا يؤدى الى العلاقة التالية لهذا الثابت $N_{\ell m}$

$$N_{\ell m} = \frac{(2\ell+1)\,(\ell-|m|)\,!}{4\pi\,(\ell+|m|)\,!} \qquad (6.59)$$

ويتبقى لدينا الآن معالجة معادلة شرودنجر الخاصة بالدالة النصف قطريـــة $R(r)$ للوصول الى الصورة النهائية للدالة الموجية $\psi(r, \theta, \phi)$ وهذا يتم علـــــى النحو التالى :

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)R(r) + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0 \qquad (6.60)$$

حيث عوضنا عن الثابت λ بالمقدار $l(l+1)$ وعن $V(r)$ بالمقـــــدار $(-Ze^2/4\pi\epsilon_0 r)$.

ومن المناسب تبسيط المعادلة (6.60) باستبدال الدالة $R(r)$ بدالــة جديدة $u_l(r)$ العلاقة بينهما هى :

$$u_l(r) = r\,R(r) \qquad (6.61)$$

فتصبح المعادلة (6.60) على الصورة التالية :

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u_l(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E\right)u_l(r) = 0 \qquad (6.62)$$

مع مراعاة ان الدالة u_l تتصف بانها تعتمد على قيمة عدد الكم l كما انهـــــا تحقق كلا من شرط المعايرة وشرط التلاشى عند $r = 0$ ، $r = \infty$.

ولتبسيط المعالجة الرياضية مرة اخرى نُعبر عن المتغير المستقل r بوحـــدات نصف قطر بوهر r_B بحيث :

$$\frac{r}{r_B} = \rho \qquad (6.63)$$

حيث

$$r_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu Ze^2}$$

وبذلك نكون قد استبدلنا البعد r بمتغير ρ ليس له ابعاد • وبالمثـــــل نستبدل الطاقة الكلية E بكمية ليس لها ابعاد وذلك بالتعبير عـــــن E بدلالة ثابت ريدبرج ϵ_{Rd} حيث

$$\epsilon = \frac{E}{\epsilon_{Rd}} \tag{6.64}$$

$$\epsilon_{Rd} = \frac{\mu Z^2 e^4}{\hbar^2} \tag{6.65}$$

وعليه تصبح المعادلة (6.62) على الصورة الاتية :

$$\frac{d^2 u_l(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\epsilon^2}{1} \right] u_l(\rho) = 0 \tag{6.65}$$

مع مراعاة ان الطاقة ϵ هى فى الحقيقة كمية سالبة لأن الالكترون فى ذرة الهيدروجين وماشابهها يكون مجموعة مرتبطة (اى انه ليس حرا) ولذلك تكتب المعادلة الاخيـــــرة (6.65) على الصورة التالية :

$$\frac{d^2 u_l(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \epsilon \right] u_l(\rho) = 0 \tag{6.66}$$

وعندما تقرب ρ من مالانهاية فان المعادلة (6.66) تختزل الى الصورة التالية :

$$\frac{d^2 u_l(\infty)}{d\rho^2} - \epsilon\, u_l(\infty) = 0 \tag{6.67}$$

فيكون الحل الاسيمبتوتى Asymptotic Solution هو

$$u_l(\infty) = e^{-\sqrt{\epsilon}\,\rho} \tag{6.68}$$

حيث اخذنا فى الاعتبار حسن سلوك الدالة وعلى هذا يكون الحل العام للدالـــــة $u_l(\rho)$ هو

$$u_l(\rho) = u_l(\infty)\ V_l(\rho) = e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho}\ V_l(\rho) \qquad (6.69)$$

وحيث ان المعادلة (6.66) تتصف بأن لها نقطة شاذة (منفردة) عند $\rho_o = 0$ لذا نتبع نفس الاسلوب المتبع فى مثل هذه الحالة والذى اوضحناه عند ايجاد الحـــل $Y_l^m(\theta, \phi)$ وهذا معناه وضع الدالة $V_l(\rho)$ على الصورة التالية :

$$V_l(\rho) = \sum a_k (\rho - \rho_o)^{k+s} = \sum_i a_k\ \rho^{k+s} \qquad (6.70)$$

$$\therefore \frac{du_l}{d\rho} = e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \left(\sum_k a_k (k+s)\ \rho^{k+s-1} \right) - \sqrt{\epsilon}\cdot e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \sum a_k\ \rho^{k+s} \qquad (6.71)$$

$$, \frac{d^2u_l}{d\rho^2} = e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \left[\sum_k a_k(k+s)(k+s-1)\ \rho^{k+s-2} \right] - \sqrt{\epsilon}\, e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \left[\sum a_k(k+s)\ \rho^{k+s-1} \right] - \sqrt{\epsilon}\, e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \left[\sum a_k(k+s)\ \ \ k+s-1 \right] + \epsilon\, e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \left[\sum a_k\ \ \ k+s \right] \qquad (6.72)$$

$$\therefore e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} \Big[\sum_k a_k (k+s)(k+s-1)\ \rho^{k+s-2} - 2\sqrt{\epsilon} \sum_k a_k(k+s)\ \rho^{k+s-1} + \epsilon \sum_k a_k\ \rho^{k+s} \Big] + \Big[2Z \sum_k a_k\ \rho^{k+s-1} - l(l+1) \sum_k a_k\ \rho^{k+s-2} - \epsilon \sum_k a_k\ \rho^{k+s} \Big\}\ e^{-\sqrt{\epsilon}\cdot\rho} = 0 \qquad (6.73)$$

$$\therefore \left[\sum_k a_k (k+s)(k+s-1) \rho^{k+s-2} - 2\sqrt{\epsilon} \sum_k (k+s) \rho^{k+s-1} \right]$$

$$+ \left[2Z \sum_k a_k \rho^{k+s-1} - \ell(\ell+1) \sum_k a_k \rho^{k+s-2} \right] = 0 \qquad (6.74)$$

وبمساواة معامل أقل قوة (s-2) للمتغير ρ بالصفر نحصل على :

$$s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0$$

$$\therefore \quad s = -\ell \qquad (6.75)$$

$$, \quad s = \ell + 1 \qquad (6.76)$$

ولكن الحل $s = -\ell$ لايحقق الشرط الحدى عند نقطة الاصل $(\rho = 0)$ لـــذا يجب علينا استبعاده ويتبقى الحل المقابل $s = \ell + 1$ وبالتعويض عن $s = \ell + 1$ فى المعادلة (6.74) مع استبدال القيمة k بالقيمة k+1 فى المتسلسلة الاولى فقط للحصول على معامل $\rho^{k+\ell}$ نجد ان :

$$\sum_k a_{k+1}(k+\ell+2)(k+\ell+1) \rho^{k+\ell} - \ell(\ell+1) a_{k+1} \rho^{k+\ell}$$

$$- 2\sqrt{\epsilon} \sum a_k (k+\ell+1) \rho^{k+\ell} + 2Z \sum a_k \rho^{k+\ell} = 0 \qquad (6.77)$$

$$\sum_k \left[\left\{ (k+\ell+2)(k+\ell+1) - \ell(\ell+1) \right\} a_{k+1} \right.$$

$$\left. - 2 \left\{ \sqrt{\epsilon}(k+\ell+1) Z \right\} a_k \right] \rho^{k+\ell} = 0 \qquad (6.78)$$

هذه المعادلة صحيحة لجميع قيم ρ وهذا معناه ان معامل ρ مرفوعة لأى قـــوة $k+\ell$ يجب ان يكون مساويا للصفر وعلى هذا نحصل على معادلة ربط المعامـــلات الاتية :

$$a_{k+1} = \frac{2\,(\sqrt{\epsilon}\,(k+l+1) - Z)}{(k+l+2)\,(k+l+1) - l\,(l+1)}\,a_k \qquad (6.79)$$

وبما ان المتسلسلة يجب ان تكون ذات قيمة محدودة اى يجب ان تنتهى عند حد معين وليكن الحد رقم k هو آخر حد فيها لذلك فالمعامل a_{k+1} يجب ان يساوى صفرا وهذا معناه ان :

$$\sqrt{\epsilon}\,(k+l+1) = Z \qquad (6.80)$$

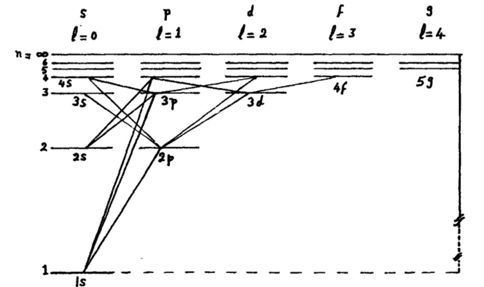
وبوضع $(k+l+1) = n$

$$\therefore \quad \sqrt{\epsilon}\,.\,n = Z$$

$$\therefore \quad \epsilon = \frac{Z^2}{n^2} \qquad (6.81)$$

$$\therefore \quad E = -\frac{\epsilon_{Rd}\,Z^2}{n^2} \qquad (6.82)$$

حيث $n = 1, 2, 3, \ldots$ • وهى نفس النتيجة التى حصل عليها العالم بوهر قبل اكتشاف ميكانيكا الكم بحوالى احدى عشر عاما كما هو معلوم •



شكل (٦ـ٢) توضيح توزيع مستويات الطاقة لذرات شبيهة الهيدروجين تبعا لمعالجة شرودنجر • مع ملاحظة ان الانتقالات المسموح بها بين تلك المستويات تتصف بتغير فى قيمة عدد الكم l مساويا للوحدة •

مثال (٦_١) :

عين مستويات الطاقة والدوال الموجية المقابلة لجسيم يتحرك داخل بئـــــر جهدى يتميز بتماثل كرى ونصف قطره a والصفات الحدية التالية :

في حالة r اصغر من a $(r < a)$ $V(r) = 0$

وفي حالة r اكبر من a $(r > a)$ $V(r) = \infty$

الحــــل :

في حالة متذبذب توافقي متجانس في الابعاد الثلاثة فان طاقة الوضع تأخـــــذ الصورة :

$$V = \frac{1}{2} m w^2 (x^2 + y^2 + z^2)$$

$$= \frac{1}{2} m w^2 r^2$$

وعلى ذلك فان الجهد يتميز بتماثل كرى وبالتالي فمن الممكن حل معادلة شرودنجـــر باستخدام الاحداثيات الكرية • حيث يكون الجزء الزاوى من الدالة الموجية هو الدالـــة التوافقية الكرية $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ ويمكن اذاً كتابة الدالة الموجية بالصورة :

$$\psi (r, \theta, \phi) = R(r) Y_{\ell m} (\theta, \phi)$$

حيث الجزء النصف قطرى من الدالة الموجية $R(r)$ يحقق المعادلة :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{m w^2 r^2}{2} \right] R(r) = 0$$

وبادخال متغير يتميز بأنه ليس له ابعاد :

$$\xi = \frac{m w}{\hbar} r^2$$

نحصل على :

$$\frac{d^2R}{d\xi^2} + \frac{3}{2}\frac{dR}{d\xi} + \left[\frac{E}{2\hbar w} - \frac{\ell(\ell+1)}{4\xi} - \frac{\xi}{4}\right]R(\xi) = 0$$

وعند $\xi \to \infty$ (ξ تقرب من مالانهاية) فان حل تلك المعادلة يصبح

$$R(\xi) \sim e^{\pm\frac{\xi}{2}}$$

وهذا يشير الى امكانية الوصول الى حل دقيق للمعادلة اعلاه على صورة :

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \cdot \sum_{r=0}^{\infty} a_r \; \xi^{r+s}$$

وبالتعويض في المعادلة التفاضلية التي نود حلها نحصل على :

$$s(s-1) + \frac{3}{2}s - \frac{\ell(\ell+1)}{4} = 0$$

وجذرها التربيعي الموجب هو : $s = \frac{1}{2}\ell$

(ويُستبعد الجذر التربيعي السالب حيث ذلك يؤدى الى جعل الدالــــة $R(\xi)$ تقرب من ∞ عند $r = 0$ • وعلى ذلك فان باستطاعتنا فرض الحل بالصورة :

$$R(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \; \xi^{\frac{\ell}{2}} \; W(\xi)$$

حيث يحقق الجزء $W(\xi)$ العلاقة التالية :

$$\xi\frac{d^2W}{d\xi^2} + \left[c - \xi\right]\frac{dW}{d\xi} - b\,W(\xi) = 0$$

وفيها $c = \ell + \frac{3}{2}$ ، $b = -\frac{E}{2\hbar w} + \frac{\ell}{2} + \frac{3}{2}$ • وهذه المعادلـة هى المعادلة الهندسية التى ينتهى اليها فى التحليل الحالى وحلها الذى يتميـــــز بعدم التفرق عند $0 =$ هو :

$$W(\xi) = {}_1F_1\ (b,\ c, \xi\ )$$

$$= \left[1 + \frac{b}{c}\frac{\xi}{1!} + \frac{b(b+1)\ \xi^2}{c(c+1)\ 2!} + \frac{b}{c}\ \frac{(b+1)(b+2)}{(c+1)(c+2)}\ \frac{\xi^3}{3\ !} + \ldots\right]$$

واذا لم توضع نهاية لهذه المتسلسلة فان الدالة F يحدث ان تتفرق مثل $\exp\ (\xi)$ عندما تقرب ξ من ∞ ومعنى هذا ان $R(\xi)$ هي بالتالي تتفرق مثل $\exp\ (\xi/2)$. وعلى ذلك يجب ان يوضع نهاية للمتسلسلة وهذا يعني ان :

$$b = 0,\ -1,\ -2$$

أو $$-\frac{E}{2\ \hbar w} + \frac{\ell}{2} + \frac{3}{2} = -p\ ;\quad \left[p = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\right]$$

أو $$E = \hbar w\quad \left[\ \ell\ + 2\ p + \frac{3}{2}\right]$$

ويتضح من هذه النتيجة ان المتذبذب التوافقي المتجانس في ثلاث ابعاد يتميز بمجموعة لانهائية من مستويات طاقة منفصله بقيم متساوية عن بعضها .

وباستخدام الخصائص الاساسية للدوال الهندسية يمكن توضيح ان الدوال الأيجينية المعايرة تعطى كما يلي :

$$\psi\ (r,\theta,\phi) = \sqrt{2}\ \left(\frac{mw}{\hbar}\right)^{\frac{\ell}{2}+\frac{3}{4}} \left[\frac{(\ell+\frac{3}{2})(\ell+\frac{5}{2})\ \ldots\ (\ell+\ p\ +\ \frac{1}{2})}{\Gamma(\ell\ +\frac{3}{2})\ p\ !}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\cdot \exp\ \left(-\ \frac{mwr^2}{2\ \hbar}\right)\ r_1^{\ell}\ F_1\left(-p,\ \ell+\frac{3}{2}\ ,\ \frac{mwr^2}{\hbar^2}\right)\ Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

عندما تكون $p = 1,2,3$

بينما :

$$\psi(r,\theta,\phi) = \left[\frac{2}{\Gamma(\ell+\frac{3}{2})}\right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{mw}{\hbar}\right)^{\frac{\ell}{2}+\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{mwr^2}{2\hbar}\right) r^{\ell} Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

عندما تكون $p = 0$

الباب الســـابع

المعالجة الرياضية التقريبية فى ميكانيكا الكم
نظرية الاقلاق أو الاضطراب

MATHEMATICAL APROXIMATION METHODS IN QUANTUM MECHANICS
(PERTURBATION THEORY)

الباب السابع

المعالجة الرياضية التقريبية فى ميكانيكا الكم
نظرية الاقلاق أو الاضطراب

MATHEMATICAL APROXIMATION METHODS IN QUANTUM MECHANICS
(PERTURBATION THEORY)

يُقابلنا فى ميكانيكا الكم عدد قليل للغاية من المسائل الفيزيائية التى يمكن معالجتها معالجة رياضية دون اى تقريب بينما معظم المسائل الاخرى تكون اكثر تعقيدا لدرجـة انه من المستحيل معالجتها دون تقريب ولذلك فانه من المعتاد ان تتم مثل هـذه المعالجات فى اطار طرق تقريبية من أهمها مايسمى بطرق الاقلاق •

ويُقصد بالاقلاق هو ان تتعرض المجموعة الفيزيائية لمؤثرات (عوامل الاقلاق) ينتـج عنها ان تتغير المستويات الذاتية الاصلية (مستويات ماقبل الاقلاق Unperturbed الى مستويات ذاتية أخرى تسمى مستويات مابعد الاقلاق ـ Perturbed ـ وهـذه يقابلها مايسمى بالدوال الذاتية الناتجة عن عملية الاقلاق (Perturbed Eigenfunctions) • مثال ذلك :

١ ـ تَعرض مجموعة ذرات لمادة ما لمجالات كهرومغناطيسية •

٢ ـ استطارة حزمة من الجسيمات الاولية تحت تأثير المجال النووى لانوية ذرات المادة التى تخترقها تلك الجسيمات •

٣ ـ انبعاث اشعاعات الميزر والليزر تحت ظروف مُحددة •

وطريقة الاقلاق تعتمد اساسا على اعتبار ان العاملة الهاميلتونية $\hat{H}$ للمجموعة الفيزيائية وهى تحت تأثير عامل الاقلاق (الاضطراب) مكونة من جزئين اولهمـا $\hat{H}_o$

يقابل العاملة الهاميلتونية للمجموعة الفيزيائية في حالة غياب عامل الاقلاق وثانيهما $\hat{H}'$ ويفترض فيه دائما أنه يمثل جزءا صغيرا بالنسبة للعاملة $\hat{H}_o$ وفي ضوء ذلك يمكن كتابة معادلة شرودنجر للمجموعة الفيزيائية التي تعرضت للاقلاق على الصورة الاتية :

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n \qquad (7.1)$$

مع مراعاة الشروط الحدية المعتادة ، حيث :

$$\hat{H} = \hat{H}^{(o)} + \hat{H}' \qquad (7.2)$$

وفي المقابل :

$$\psi_n = \psi_n^{(o)} + \psi_n' \qquad (7.3)$$

حيث كلا ψ_n ، $\psi_n^{(o)}$ معايرتين ، مع ملاحظة ان :

$$E_n = E_n^{(o)} + E_n' \qquad (7.4)$$

وأن E_n' ، ψ_n' التغيرات الاقلاقية في كل من E_n ، ψ_n نتيجة تأثير $\hat{H}'$. علاوة على ذلك بكتابتنا كل من مستويات الطاقة والدوال على الصورة E_n ، ψ_n فان ذلك سببه انها تقابل احداهما الاخرى بمعنى أن $\psi_n^{(o)}$ هي الحالة التي تؤول اليها ψ_n في حالة تلاشي طاقة الاقلاق تدريجيا .

وتعتمد الطريقة العامة للمعالجة التقريبية التي نحن بصددها بأنه يُعبر عن كل من الدوال ψ_n والمستويات E_n على صورة متسلسلة بدلالة قوى لمعامل اختياري حقيقي يرمز له في العادة بالرمز λ وقيمته اصغر من الواحد الصحيح ويعرّف من العلاقة الاتية :

$$\hat{H}' = \lambda\hat{H}^{(1)} + \lambda^2\,\hat{H}^{(2)} + \lambda^3\,\hat{H}^{(3)} + \dots \qquad (7.5)$$

فتأخذ المتسلسلة الخاصة بالدوال ψ_n ، الخاصة بالمستويات E_n الصور التاليه :

$$\psi_n = \psi_n^{(o)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots \qquad (7.6)$$

$$E_n = E_n^{(o)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \qquad (7.7)$$

وحيث ان المعامل الاختيارى λ المفترض فيه ان قيمته صغيرة لدرجة اعتبار $\lambda\hat{H}^{(1)}$ صغيرة جدا بالنسبة للعاملة $\hat{H}_o$ فانه يكتفى فى معادلة (7.5) بالحد الاول فقط اى نضع :

$$\hat{H} = \hat{H}^{(o)} + \lambda\hat{H}^{(1)} \qquad (7.8)$$

وعلى ذلك فانه بالتعويض من المعادلات (7.8) ، (7.6) ، (7.7) فى المعادلة (7.1) :

$$(\hat{H}^o + \lambda\hat{H}^{(1)})\,(\psi_n^{(o)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots)$$

$$= (E_n^{(o)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(\psi_n^{(o)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots \qquad (7.9)$$

$$\therefore\ \hat{H}^o\psi_n^{(o)} + \lambda\hat{H}^{(o)}\psi_n^{(1)} + \lambda^2\hat{H}^{(o)}\psi_n^{(2)} + \dots$$

$$+ \lambda\hat{H}^{(1)}\psi_n^{(o)} + \lambda^2\hat{H}^{(1)}\psi_n^{(1)} + \lambda^3\hat{H}^{(1)}\psi_n^{(2)} + \dots$$

$$- E_n^{(o)}\psi_n^{(o)} - \lambda E_n^{(o)}\psi_n^{(1)} - \lambda^2 E_n^{(o)}\psi_n^{(2)} - \dots$$

$$- \lambda E_n^{(1)}\psi_n^{(o)} - \lambda^2 E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} - \lambda^3 E_n^{(1)}\psi_n^{(2)} - \dots$$

$$- \lambda^2 E_n^{(2)}\psi_n^{(o)} - \lambda^3 E_n^{(2)}\psi_n^{(1)} - \dots$$

$$= 0 \qquad (7.10)$$

ولكى تكون هذه المعادلة صحيحة يجب ان يساوى كل من معاملات القوى المختلفـــة للمعامل λ كل على حدة المقدار صفر • أى ان :

$$\hat{H}^{(o)}\psi_n^{(o)} - E_n^{(o)}\psi_n^{(o)} = 0 \qquad (7.11)$$

$$\hat{H}^{(o)}\psi_n^{(1)} + \hat{H}^{(1)}\psi_n^{(o)} - E_n^{(o)}\psi_n^{(1)} - E_n^{(1)}\psi_n^{(o)} = 0 \qquad (7.12)$$

$$\hat{H}^{(o)}\psi_n^{(2)} + \hat{H}^{(1)}\psi_n^{(1)} - E_n^{(o)}\psi_n^{(2)} - E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} - E_n^{(2)}\ {}_n^{(o)} = 0 \qquad (7.13)$$

....

.... الخ

ونلاحظ ان المعادلة الاولى تتعلق بالمجموعة الفيزيائية قبل ان تتعرض لعامل الاقـــلاق وهى محققة تلقائيا •

أما المعادلة الثانية (7.12) فان حلها يؤدى الى تعيين قيمـــة $E_n^{(1)}$ وهو يمثل التصحيح ذى الرتبة الاولـــى (First-order correction) الذى يجب ان يضاف الى القيمة $E_n^{(o)}$ الخاصة بطاقة المجموعة الفيزيائية قبـــــل الاقلاق •

وبالمثل فان المعادلة الثالثة (7.13) يؤدى حلها الى تعيين $E_n^{(2)}$ وهو مايسمى بالتصحيح ذى الرتبة الثانية (Second-order correction) وهكذا •

تعيين التصحيح ذى الرتبة الاولى فى اطار نظرية الاقلاق التى لاتعتمد على الزمن :

<u>أولا :</u>

لايجاد $E_n^{(1)}$ نبدأ بالمعادلة (7.12) على الصورة الاتية :

$$(\hat{H}^{(o)} - E_n^{(o)})\psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}^{(1)})\psi_n^{(o)} \qquad (7.14)$$

لحل المعادلة (7.14) نعبر عن الدالة $\psi_n^{(1)}$ على صورة متسلسلة كما يلى :

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m a_m^{(1)} \psi_m^{(0)} \qquad (7.15)$$

حيث $a_m^{(1)}$ هى معاملات غير معلومة ويتعين علينا تعيينها والدليل العلـــــوى يعبر عن معالجتنا للمجموعة الفيزيائية فى اطار نظرية الاقلاق ذات الرتبة الاولى •

وبالتعويض من المعادلة (7.15) فى المعادلة (7.14) نحصل على :

$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) \sum a_m^{(1)} \psi_m^{(0)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}^{(1)}) \psi_n^{(0)} \qquad (7.16)$$

$$\therefore \sum_m a_m^{(1)} (\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) \psi_m^{(0)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}^{(1)}) \psi_n^{(0)} \qquad (7.17)$$

$$\therefore \sum_m a_m^{(1)} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \psi_m^{(0)} = (E_n^{(1)} - \hat{H}^{(1)}) \psi_n^{(0)} \qquad (7.18)$$

وبضرب المعادلة (7.18) من اليسار فى الدالة $\psi_n^{(0)*}$ واجراء التكامل نحصل على :

$$\sum_m a_m^{(1)} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \int \psi_n^{(0)*} \psi_m \, d\tau$$

$$= E_n^{(1)} \int \psi_n^{(0)*} \psi_n^{(0)} \, d\tau - \int \psi_n^{(0)*} H^{(1)} \psi_n^{(0)} \, d\tau \qquad (7.19)$$

وحيث ان التكامل فى الطرف الايسر من المعادلة (7.19) يساوى صفرا لجميع قيم m فيما عدا القيمة $m = n$ وفى هذه الحالةفان القوس : $(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})$ يتلاشى • وهذا معناه ان الطرف الايسر للمعادلة (7.19) يساوى صفـــــــرا بينما فى الطرف الايمن فان التكامل الاول يساوى واحد صحيح وعلى ذلك نحصل على :

$$\therefore \quad 0 = E_n^{(1)} - \int \psi_n^{(o)*} H^{(1)} \psi_n^{(o)} d\tau$$

$$\therefore \quad E_n^{(1)} = \int \psi_n^{(o)*} H^{(1)} \psi_n^{(o)} d\tau = H_{nn}^{(1)} \qquad (7.20)$$

أى ان التصحيح الاول للطاقة عبارة عن القيمة المتوقعة للحد الاول من حدود الاقــــلاق فى العاملة الهاميلتونية $\hat{H}$.

والمقدار $\hat{H}_{nn}^{(1)}$ يسمى بعنصر الصفوفة الخاص بالعاملة الهاميلتونيـــــــــة للاقلاق .

مثـــال (٧ـ ١)

مبتدئا بالمعادلة (7.18) وهى :

$$\sum_m a_m^{(1)} (E_m^{(o)} - E_n^{(o)}) \psi_m^{(o)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(o)} - \hat{H}' \psi_n^{(o)}$$

استنتج علاقة عامة تعطى قيمة المعاملات $a_m^{(1)}$ لأى قيمة للدليل m .

الحـــــل :

لنبدأ بضرب المعادلة المعطاه فى الدالة $(\psi_j^{(o)})^*$ من جهة اليســـــار ونجرى عملية التكامل كالمعتاد :

$$\sum_m a_m^{(1)} (E_m^{(o)} - E_n^{(o)}) \int (\psi_j^{(o)})^* \psi_m^{(o)} d\tau$$

$$= E_n^{(1)} \int (\psi_j^{(o)})^* \psi_n^{(o)} d\tau - \int (\psi_j^{(o)})^* \hat{H}' \psi_n^{(o)} d\tau$$

$$\therefore \sum_m a_m^{(1)} (E_m^{(o)} - E_n^{(o)}) \delta_{jm} = E_n^{(1)} \delta_{jn} - H'_{jn} \qquad (i)$$

عندما يكون $m = j$ ، $j \neq n$ فان المعادلة (i) تأخذ الصورة التالية :

$$a_j^{(1)} \left(E_j^{(o)} - E_n^{(o)}\right) = - H'_{jn} \qquad \text{(ii)}$$

$$\therefore \quad a_j^{(1)} = \frac{H'_{jn}}{\left(E_n^{(o)} - E_j^{(o)}\right)} \qquad \text{(iii)}$$

العلاقة (iii) تعطى جميع قيم المعاملات $a_j^{(1)}$ ماعدا المعامـــــل $a_n^{(1)}$ أى المعامل الذى فيه $j = n$ ، وهذه الحالة الخاصة يمكننا حلها كما يلى :

نعلم أن الدالة ψ_n يجب ان تحقق شرط المعايرة ويمكن كتابته على الصورة التالية :

$$\int \psi_n^* \; \psi_n \, d\tau = \langle \psi_n \, , \; \psi_n \rangle = 1 \qquad \text{(iv)}$$

وحيث ان الدالة ψ_n يمكن كتابتها على الصورة (راجع معادلة "7.15") :

$$\psi_n = \psi_n^{(o)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \; \psi^{(2)}$$

بينما

$$\psi_n^{(1)} = \sum a_m^{(1)} \; \psi_m^{(o)}$$

$$\therefore \psi_n = \psi_n^{(o)} + \lambda \left[a_n^{(1)} \psi_n^{(o)} + \sum_{\substack{m \\ (m \neq n)}} \frac{H'_{mn}}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} \psi_m^{(o)} \right] \qquad \text{(v)}$$

وبالتعويض من (v) فى (iv) نحصل على (مُكْتَفِين بالتقريب ذى الرتبـــــة الاولى)

$$1 = \langle \psi^{(o)} + \lambda \psi_n^{(1)} \, , \; \psi_n^{(o)} + \lambda \psi_n^{(1)} \rangle$$

$$1 = \int \psi^{(o)*} \psi^{(o)} \, d\tau + \lambda \left[\int \psi_n^{(1)*} \psi_n^{(o)} \, d\tau + \int \psi_n^{(o)*} \; \psi_n^{(1)} \, d\tau \right] + 0$$

$$\therefore 1 = 1 + \lambda\left[\int (\psi_n^{(1)})^* \psi_n^{(o)} \, d\tau + \int (\psi_n^{(o)})^* \psi_n^{(1)} \, d\tau + \right] 0$$

$$\therefore \left[\int (\psi_n^{(1)})^* \psi_n^{(o)} \, d\tau + \int (\psi_n^{(o)})^* \psi_n^{(1)} \, d\tau \right] = 0$$

$$\therefore \sum_m a_n^{(1)*} \int \psi_m^{(o)*} \psi_n^{(o)} \, d\tau + \sum_m a_m^{(1)} \int \psi_n^{(o)*} \psi_m^{(o)} \, d\tau$$

$$\therefore (a_n^{(1)})^* + a_n^{(1)} = 0 \qquad \text{(vii)}$$

وبوضع المعامل $a_n^{(1)} = A + iB$

نجد ان المعادلة (vii) تؤدى الى أن :

$$(A - iB) + (A + iB) = 0$$

$$2A = 0$$

أى ان المعامل a_n عبارة عن كمية تخيلية : $a_n^{(1)} = (iB)$.

وبوضع هذه النتيجة فى معادلة رقم (7.5) نحصل على :

$$\psi_n = \psi_n^{(o)} + iB\lambda\psi_n^{(o)} + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} \psi_m^{(o)}$$

$$\psi_n = (1 + iB\lambda)\psi_n^{(o)} + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} \psi_m^{(o)}$$

$$\int \psi_n^* \psi_n \, d\tau = \int \left| (1 + iB \quad) \right|^2 \psi_n^{(o)*} \psi_n^{(o)} \, d\tau + \ldots$$

$$\therefore 1 = 1 + B^2 \lambda^2$$

$$\therefore B^2 \lambda^2 = 0$$

وبما ان λ^2 لاتساوى صفرا

$$\therefore \; B = 0$$

$$\therefore \; a_n^{(1)} = 0$$

وهو المطلوب فى المثال الحالى كحالة خاصة عندما يكون $j = n$ فى المعادلة (iii) ٠

ثانيا : تعيين التصحيح ذى الرتبة الثانية فى اطار نظرية الاقلاق التى لاتعتمد على الزمن :

(Time Independent Second-Order Perturbation Correction)

فى المعادلة (7.13) وهى :

$$\hat{H}^{(o)} \psi_n^{(2)} + \hat{H}^{(1)} \psi_n^{(1)} = E_n^{(o)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(o)} \qquad (7.13)$$

نفك الدوال $\psi_n^{(2)}$ بدلالة الدوال الذاتية للعاملة الهاميلتونية $\hat{H}_o$ على الصورة التى سبق استخدامها بالنسبة للدوال $\psi_n^{(1)}$ فى المعادلة (7.15) اى ان :

$$\psi_n^{(2)} = \sum_m a_m^{(2)} \psi_m^{(o)} \qquad (7.21)$$

والدليل العلوى (2) يعبر عن حقيقة اننا نعالج الرتبة الثانية فى اطار نظرية الاقلاق ٠

وبالتعويض فى المعادلة (7.13) عن كل من $\psi_n^{(1)}$ ، $\psi_n^{(2)}$ من المعادلتين (7.15) ، (7.21) على التوالى نحصل على :

$$\sum_m a_m^{(2)} \hat{H}^{(o)} \psi_m^{(o)} + \hat{H}' \sum_m a_m^{(1)} \psi_m^{(o)}$$

$$= E_n^{(o)} \sum_m a_m^{(2)} \psi_m^{(o)} + E_n^{(1)} \sum_m a_m^{(1)} \psi_m^{(o)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(o)} \ldots$$

وبضرب هذه المعادلة من جهة اليسار في $(\psi_k^{(o)})^*$ واجراء التكامل كالمعتـــــاد نحصل على :

$$\sum_m a_m^{(2)} \int (\psi_k^{(o)})^* \hat{H}^o \psi_m^{(o)} \, d\tau + \sum_m a_m^{(1)} \int (\psi_k^{(o)})^* H' \psi_m^{(o)} \, d\tau$$

$$= E_n^{(o)} \sum_m a_m^{(2)} \int (\psi_k^{(o)})^* \psi_m^{(o)} \, d\tau$$

$$+ E_n^{(1)} \sum_m a_m^{(1)} \int (\psi_k^{(o)})^* \psi_m^{(o)} \, d\tau$$

$$+ E_n^{(2)} \int (\psi_k^{(o)})^* \psi_n^{(o)} \, d\tau$$

$$\therefore \sum_m a_m^{(2)} E_m^{(2)} \delta_{km} + \sum_m a_m^{(1)}$$

$$= E_n^{(o)} \sum_m a_m^{(2)} \delta_{km} + \hat{H}'_{nn} \sum_m a_m^{(1)} \delta_{km} + E_n^{(2)} \delta_{kn}$$

$$\therefore a_k^{(2)} E_k^{(o)} + \sum_m a_m^{(1)} \hat{H}'_{km}$$

$$= E_n^{(o)} a_k^{(2)} + \hat{H}'_{nn} a_k^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{kn}$$

$$\therefore a_k^{(2)} (E_n^{(o)} - E_k^{(o)}) + E_n^{(2)} \delta_{kn}$$

$$= \sum_m a_m^{(1)} \hat{H}'_{km} - a_k^{(1)} \hat{H}'_{nn} \qquad (7.22)$$

وعندما تكون $n = k$ فان :

$$\therefore 0 + E_n^{(2)} = \sum_m a_m^{(1)} H'_{nm} - a_n^{(1)} H'_{nn}$$

وحيث ان المعامل $a_n^{(1)}$ يساوى صفرا (راجع صفحة ١٦٧)

$$\therefore E_n^{(2)} = \sum_m a_m^{(1)} H'_{nm} \qquad (7.23)$$

وبما ان $a_m^{(1)}$ تساوى $\left[H'_{mn} / (E_n^{(o)} - E_m^{(o)}) \right]$

$$\therefore E_n^{(2)} = \sum_{\substack{m \\ (m \neq n)}} \frac{H'_{mn} H'_{nm}}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}}$$

وحيث ان : $H'_{nm} = (H'_{mn})$

$$\therefore E_n^{(2)} = \sum_{\substack{m \\ (m \neq n)}} \frac{{H'_{mn}}^2}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} \qquad (7.24)$$

وهذا يعطى التصحيح ذى الرتبة الثانية تبعا لنظرية الاقلاق التى لاتعتمد على الزمن بالنسبة للقيم الذاتية للطاقة . ونود ان نشير هنا الى انه فى حالة عدم تساوى $n = k$ أى أن $k \neq n$ فان المعادلة (7.22) تؤول الى الصورة التالية :

$$a_k^{(2)} (E_n^{(o)} - E_k^{(o)}) = \sum_m a_m^{(1)} H'_{km} - a_k^{(1)} H'_{nn} \qquad (7.25)$$

$$\therefore a_k^{(2)} = \sum_{\substack{m \\ (m \neq n)}} \frac{H'_{mn} H'_{km}}{(E_n^{(o)} - E_m^{(o)})} - \frac{H'_{kn} H'_{nn}}{(E_n^{(o)} - E_k^{(o)})^2} \qquad (7.26)$$

نظرية الاقلاق ذى الرتبة الاولى فى حالة وجود اضمحــــلال degeneracy

(انتماء متعدد) :

لتبسيط المسألة التى نحن بصددها لنعتبر ان المجموعة الفيزيائية تتصف بحالــة ميكانيكية كمية ثنائية الانتماء بمعنى ان هناك دالتين $\psi_1^{(o)}$ ، $\psi_2^{(o)}$ تنتميــان لمستوى طاقة مشترك $E^{(o)}$.

أى ان :

$$H^{(o)} \psi_1^{(o)} = E^{(o)} \psi_1^{(o)} \qquad (1)$$

$$H^{(o)} \psi_2^{(o)} = E^{(o)} \psi_2^{(o)}$$

وعليه فان الجمع الخطى لهاتين الحالتين $C_1 \psi_1^{(o)} + C_2 \psi_2^{(o)}$ يمثــــل ايضا حالة كمية تنتمى لنفس مستوى الطاقة المشترك $E^{(o)}$ اى ان :

$$\psi^{(o)} = C_1 \psi_1^{(o)} + C_2 \psi_2^{(o)} \qquad (3)$$

$$H^{o} (C_1 \psi_1^{(o)} + C_2 \psi_2^{(o)}) = E^{o} (C_1 \psi_1^{(o)} + C_2 \psi_2^{(o)}) \qquad (4)$$

ونفترض الان ان تلك المجموعة الفيزيائية تتعرض الى اقلاق صغير H' وعليه كمـــا سبق تكون العاملة الهاميلتونية هى $(\hat{H}^{(o)} + \hat{H}')$ وتكون الدالة الناتجة هــــى عبارة عن $(\psi^{(o)} + \psi^{(1)})$ والتى يفترض فيها انها تختلف اختلافا بسيطا عــــن $\psi^{(o)}$ وعليه تأخذ معادلة شرودنجر الصورة التالية :

$$(\hat{H}^{(o)} + \hat{H}^{(1)}) (\psi^{(o)} + \psi^{(1)}) = (E^{(o)} + E^{(1)})(\psi^{(o)} + \psi^{(1)}) \qquad (5)$$

وباهمال الكميتين الصغيرتين $\psi^{(1)} H^{(1)}$ ، $\psi^{(1)} E^{(1)}$ نجد ان :

$$(\hat{H}^{(o)} - E^{(o)})\psi^{(1)} + (\hat{H}^{(1)} - E^{(1)})\psi^{(o)} = 0$$

وبالتعويض عن $\psi^{(o)}$ من المعادلة الاولى نحصل على :

$$(H^{(o)} - E^{(o)})\psi^{(1)} + (H^{(1)} - E^{(1)})(C_1\psi_1^{(o)} + C_2\psi_2^{(o)}) = 0 \qquad (6)$$

وبضرب هذه المعادلة فى $\psi_1^{(o)*}$ من جهة اليسار ثم اجراء التكامل نحصـــــل علـــى :

$$\int\psi_1^{(o)*} H^{(o)}\psi^{(1)} d\tau - \int\psi_1^{(o)*} E^{(o)}\psi^{(1)} d\tau$$

$$+ \int\psi_1^{(o)*} H^{(1)} C_1\psi_1^{(o)} d\tau - \int\psi_1^{(o)} E^{(1)} C_1\psi_1^{(o)} d\tau$$

$$+ \int\psi_1^{(o)*} H^{(1)} C_2\psi_2^{(o)} d\tau - \int\psi_1^{(o)*} E^{(1)} C_2\psi_2^{(o)} d\tau = 0 \qquad (7)$$

$$\therefore 0 - 0 + \int\psi_1^{(o)*} H^{(1)} C_1\psi_1^{(o)} d\tau - \int\psi_1^{(o)*} E^{(1)} C_1\psi_1^{(o)} d\tau$$

$$+ \int\psi_1^{(o)*} H^{(1)} C_2\psi_2^{(o)} d\tau - 0 = 0$$

وباستخدام الاختصار التالى

$$\int\psi_1^{(o)*} H^{(1)}\psi_2^{(o)} d\tau = W_{12}$$

$$\therefore 0 + 0 + C_1W_{11} - C_1E^{(1)} + C_2W_{12} - 0 = 0$$

$$\therefore \ (W_{11} - E^{(1)})\ C_1 + W_{12}C_2 = 0 \qquad (8)$$

وبالمثل بضرب نفس المعادلة فى $\psi_2^{(o)*}$ من اليسار ثم اجراء التكامل ايضا نحصـــل علـى :

$$\int \psi_2^{(o)*}\, H^{(o)} \psi^{(1)}\, d\tau - \int \psi_2^{(o)*}\, E^{(o)} \psi^{(1)}\, d\tau$$

$$+ \int \psi_2^{(o)*}\, H^{(1)}\, C_1 \psi_1^{(o)}\, d\tau - \int \psi_2^{(o)*}\, E^{(1)}\, C_1 \psi_1^{(o)}\, d\tau$$

$$+ \int \psi_2^{(o)*}\, H^{(1)}\, C_2 \psi_2^{(o)}\, d\tau - \int \psi_2^{(o)*}\, E^{(1)}\, C_2 \psi_2^{(o)}\, d\tau = 0 \qquad (9)$$

$$\therefore \ W_{21}C_1 + W_{22}C_2 - E^{(1)}\ C_2 = 0$$

$$\therefore \ W_{21}C_1 + (W_{22} - E^{(1)})\ C_2 = 0 \qquad (10)$$

وهاتان المعادلتان (8) ، (10) تتحققان فى نفس الوقت فقط اذا كانت المحددة الخاصة بمعاملات حدود هما تساوى صفرا أى ان :

$$\begin{vmatrix} W_{11} - E^{(1)} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

أى ان :

$$(W_{11} - E^{(1)})\ (W_{22} - E^{(1)}) - W_{12}W_{21} = 0$$

$$\therefore\ W_{11}W_{22} - E^{(1)}\ W_{11} - E^{(1)}\ W_{22} + \left[E^{(1)}\right]^2 - W_{12}W_{21} = 0$$

ومع ملاحظة ان

$$W_{12} = W_{21}^{*}$$

اذاً

$$W_{12}W_{21} = \left|W_{12}\right|^2$$

$$\therefore\ \left[E^{(1)}\right]^2 - (W_{11} + W_{22})\ E^{(1)} + (W_{11}W_{22} - \left|W_{12}\right|^2) = 0$$

$$\therefore\ E^{(1)} = \frac{(W_{11} + W_{22}) \pm \sqrt{(W_{11} + W_{22})^2 - 4\ (W_{11}W_{22} - W_{12}{}^2)}}{2}$$

$$\therefore\ E^{(1)} = \tfrac{1}{2}\left\{W_{11} + W_{22} \pm \left[(W_{11} - W_{22})^2 + 4\left|W_{12}\right|^2\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \tag{11}$$

وحيث ان الظروف الفيزيائية فى المعتاد لاتؤدى الى احتمال ان $W_{11} = W_{22}$ وفى نفس الوقت مساواة W_{12} بالصفر فهذا معناه ان حالة الكم للمجموعة الفيزيائيــــة تحت تأثير عامل الاقلاق تفقد الصفة التى كانت عليها من ناحية الانتماء الى مستـــــوى طاقة مشترك $E^{(o)}$ وتؤدى الى ظهور حالتين كميتين مختلفتين احداهما تقابـــــل

الاشارة (+) اى تنتمى الى مستوى طاقـــة $\{ E^{(o)} + E^{(1)} \}$
والاخرى تقابل الاشارة (ـ) اى تنتمى الى مستوى طاقة $\{ E^{(o)} - E^{(1)} \}$

وتعتبر هذه النتيجة واحدة من اهم المظاهر المميزة لميكانيكا الكم عن الميكانيكـــا الكلاسيكية "النيوتونية " (هذه النتيجة مثلا هى التى ادت الى فهم الكثير مـــــن الخصائص الكهربية للمواد العازلة والموصلة والشبه موصلة وبالتالى ادت الى اكتشـــاف الترانزستور) ٠

مثـــال (٧ ـ ٢) :

وضح انه في حالة كون القيمة المتوقعة للعاملة $\hat{H}^{(1)}$ غيـر سالبة فـــان W_{12} يحقق النتيجة التالية :

$$|W_{12}|^2 \leq W_{11} W_{22}$$

الحـــل :

بما ان $E^{(1)}$ هي القيمة المتوقعة للعاملة $\hat{H}^{(1)}$ في حالة كمية معينة فمعنى ذلك ان تلك القيمة يجب ان تكون موجبة . وبأخذ القيمة الصغرى لها وهي :

$$E^{(1)} = \tfrac{1}{2} \left\{ W_{11} + W_{22} - \left[(W_{11} - W_{22})^2 + 4 \, |W_{12}|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

$$\therefore \quad W_{11} + W_{22} - \left[(W_{11} - W_{22})^2 + 4 \, |W_{12}|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \geq 0$$

$$\therefore \quad (W_{11} + W_{22})^2 \geq (W_{11} - W_{22})^2 + 4 \, |W_{12}|^2$$

$$\therefore \quad W_{11}^2 + W_{22}^2 + 2 \, W_{11} W_{22} \geq W_{11}^2 + W_{22}^2 - 2 \, W_{11} W_{22} + 4 \, |W_{12}|^2$$

$$\therefore \quad 4 |W_{11} W_{22}| \geq 4 \, |W_{12}|^2$$

$$\therefore \quad |W_{12}|^2 \leq W_{11} W_{22}$$

ملحوظة (١) :

نتيجة مباشرة لهذه الحقيقة هو ان في هذه الحالة يكون :

$$0 \leq E^{(1)} \leq W_{11} + W_{22}$$

ملحوظة (٢) :

اذا كان $\hat{T}$ عاملة هيرميتية تتبادل مع $\hat{H}^{(1)}$ ، والدالتين $\psi_1^{(o)}$ ، $\psi_2^{(o)}$ هما دالتين ذاتيتين للعاملة $\hat{T}$ تنتميان لقيمتين ذاتيتين t_1 ، t_2 فان $W_{12} = 0$. والبرهان على ذلك يمكن تبيانه كما يلى :

بما ان $\hat{T}$ ، $\hat{H}^{(1)}$ تتبادلان اذاً

$$\left[T, H^{(1)}\right] = 0$$

$$\therefore TH^{(1)} - H^{(1)}T = 0$$

$$\therefore \int \psi_1^{(o)*} \left(\hat{T}\hat{H}^{(1)} - \hat{H}^{(1)}\hat{T}\right) \psi_2^{(o)} \, d\tau = 0$$

وبما ان $\hat{T}$ هيرميتية ومراعاة أن :

$$\therefore T^*\psi_1^{(o)} = t_1 \psi_1^{(o)*} \quad , \quad T\psi_2^{(o)} = t_2 \psi_2^{(o)*}$$

$$\therefore (t_1 - t_2) W_{12} = 0 \qquad \therefore W_{12} = 0$$

لان t_1 لاتساوى t_2

مثـــال (٢ـ٣) :

لنفرض متذبذب توافقي بسيط كتلته m وثابت القوة له k وانه في الحالة الادنى بطاقته

$$E_o^{(o)} = \tfrac{1}{2} \hbar w_o \quad , \quad w_o = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

ولنفرض الان ان متذبذب توافقي بسيط آخر أُضيف بجوار المتذبذب التوافقي البسيط الاصلي المطلوب حساب قيمة الزيادة في طاقته للحالة الادنى من جراء ذلك •

الحـــل :

لمحاولة حل هذه المسألة بطريقة الاقلاق نستخدم معادلة :

$$E_n^{(1)} = \langle \hat{H}^{(1)} \rangle_n^{(o)}$$

مع ملاحظة ان $\hat{H}^{(1)}$ هنا تقابل طاقة الوضع للمتذبذب التوافقي البسيط الذي اضيف أي ان : (مع فرض ان ثابت القوة له يساوي b) :

$$\hat{H}^{(1)} = ½\, b\, x^2$$

وباستخدام دالة الموجه الخاصة بالحالة الارضية فان :

$$E^{(1)} = \langle H^{(1)} \rangle_o^{(o)}$$

$$= ½ \sqrt{\frac{m\,w_o}{\pi \hbar}} \cdot b \cdot \int_{-\infty}^{\infty} x^2\, e^{-\frac{m w_o x^2}{\hbar}}\, dx$$

$$= \frac{\hbar\, b}{4\, m\, w_o}$$

وعلى ذلك في حدود التقريب ذي المرتبة الاولى يكون :

$$E_o = E_o^{(o)} + E_o^{(1)}$$

$$\therefore \quad E_o = ½\, \hbar\, w_o + \frac{1}{4}\frac{\hbar\, b}{m\, w_o}$$

مثـــال (٧ _ ٤) :

وضح ان في مثال (٧ _ ٣) يمكننا الوصول الى نفس النتيجة دون اللجوء الـــى طريقة الاقلاق وذلك باضافة الثابت b للمتذبذب الثاني الى ثابت المتذبذب الاول k اى بتغيير k الى $k + b$.

الحـــــل :

حيث ان الثابت الجديد للمتذبذب في هذه الحالة هو $k + b$ فان التـــردد الزاوى له هو :

$$w = \sqrt{\frac{k + b}{m}}$$

وعلى فرض ان $|b|$ اقل من k

$$\therefore \; w = \left[\frac{k+b}{m}\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{k}{m}} \cdot \left[1 + \frac{b}{k}\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{k}{m}} \cdot \left[1 + \frac{b}{2\,k} - \frac{b^2}{8\,k^2} + \cdots\right]$$

وحيث ان : $w_o = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ، $k = m\,w_o^2$ اذا طاقة الحالة الارضيــة للمتذبذب تأخذ القيمة :

$$E_o = \tfrac{1}{2}\,\hbar\,w = \tfrac{1}{2}\,\hbar\,w_o\left[1 + \frac{b}{2\,mw_o^2} - \frac{b^2}{8\,m^2w_o^4} + \cdots\right]$$

ونلاحظ مباشرة ان الحدين الاولين هما في الحقيقة نفس النتيجة في الحل السابق اعلاه • ونود هنا ان نضيف مايلي :

ملحوظة (١) :

من المثالين السابقين يمكننا تبين ان الحدود المتتابعة في نظرية الاقلاق في ميكانيكا الكم هي مفكوك المتسلسلة الخاصة بالطاقة الفعلية بدلالة المعامل الصغير "b" مرفوعا لقوى متتابعة •

ملحوظة (٢) :

اذا حدث ان كان b اكبر من k فان المتسلسلة لاتنتهي (اى تتفرق) وذلك لأن b سالبة وان |b| اكبر من k فان طاقة الوضع تصبح سالبة وبالتالي فان القوة المحصلة تكون قوة طرد وليست بقوة جذب وعليه لايكون هناك حالة مترابطة على الاطلاق •

مثال (٧ ـ ٥) :

اذا كانت دالة الهاميلتونيان لمتذبذب غير توافقي على الصورة الاتية :

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \tfrac{1}{2} kx^2 + ax^4 \qquad (i)$$

فأوجد مستوى الطاقة الارضي له باستخدام نظرية الاقلاق ذى المرتبة الاولى • علما بأن دالة الحالة للمستوى الارضي للمتذبذب التوافقي تكتب على الصورة

$$\psi_o(x) = \left(\frac{k}{\pi \hbar w}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{kx^2}{2\hbar w}\right)$$

الحـــل :

بمقارنة المعادلة (١) بدالة الهاملتونيات للتذبذب التوافقي التي تكتب علـــى الصورة

$$H = \frac{p^2}{2m} + \tfrac{1}{2} kx^2 \qquad (ii)$$

يمكننا اعتبار ان الحد (ax^4) يمثل الاقلاق H' وعليه فان التصحيح للطاقـــة ذي الرتبة الاولى تبعا لنظرية الاقلاق هو

$$E_0' = H'_{00} = (\psi_0 \,,\, H' \psi_0)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* H' \psi_0 \, dx$$

$$= (\frac{k}{\pi \hbar w})^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} ax^4 \exp(-\frac{kx^2}{\hbar w}) \, dx$$

$$= (\frac{k}{\pi \hbar w})^{1/2} \cdot (\frac{-\hbar w}{2k}) \cdot a \int_{-\infty}^{\infty} x^3 \, d\left[\exp(-\frac{kx^2}{k w})\right]$$

$$= (\frac{k}{\pi \hbar w})^{1/2} \cdot a \cdot (-\frac{\hbar w}{2k}) \left\{ \left[x^3 \cdot \exp(-\frac{kx^2}{\hbar w}) \right]_{-\infty}^{\infty} \right.$$

$$\left. - \int_{-\infty}^{\infty} 3x^2 \cdot \exp(-\frac{kx^2}{\hbar w}) \, dx \right\}$$

$$= \frac{3}{2} (\frac{k}{\pi \hbar w})^{1/2} (\frac{a \hbar w}{k}) \int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-\frac{kx^2}{\hbar w}) \, x \, dx$$

$$E_o' = \frac{3}{2} \left(\frac{k}{\pi \hbar w}\right)^{1/2} \left(\frac{a\,\hbar w}{k}\right) \left(-\frac{\hbar w}{2k}\right) \int_{-\infty}^{\infty} x \; d \; \exp\left[\left(-\frac{kx^2}{hw}\right)\right]$$

$$= 0 + \frac{3\,a}{4} \left(\frac{k}{\pi \hbar w}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{\hbar w}{k}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{kx^2}{\hbar w}\right) dx$$

$$= \frac{3\,a}{4} \left(\frac{k}{\pi \hbar w}\right)^{1/2} \left(\frac{\hbar w}{k}\right)^2 \left(\frac{\hbar w}{k}\right)^{1/2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\sqrt{\frac{k}{\hbar w}}\, x\right)\right) d\left(\sqrt{\frac{k}{\hbar w}}\, x\right) \right\}$$

$$= \frac{3\,a}{4} \left(\frac{k}{\pi \hbar w}\right)^{1/2} \left(\frac{\hbar w}{k}\right)^2 \left(\frac{\hbar w}{k}\right)^{1/2} \left\{ \sqrt{\pi} \right\}$$

$$\therefore \quad E_o' = \frac{3\,a}{4} \left(\frac{\hbar w}{k}\right)^2$$

تذييـــل رقـــم (١)

قيم بعض الثوابت الفيزيائية :

1. سرعة الضوء $= C = 2.998 \times 10^{8}\ m.s^{-1}$

2. شحنة الالكترون $= e = 1.602 \times 10^{-19}$ coulomb

3. ثابت بلانك $= h = 6.626 \times 10^{-34}$ J.s.

4. النسبة بين الشحنة للكتلة للالكترون $= \frac{e}{m_e} = 1.759 \times 10^{11}$ coul./kg

5. الكتلة الساكنة للالكترون $= m_e = 9.109 \times 10^{-31}$ kg = 0.511 Mev.

6. الطول الموجي الكومتوني للالكترون $= \frac{h}{m_e c} = 2.426 \times 10^{-12}$ m

7. الكتلة الساكنة للبروتون $= 1.673 \times 10^{-27}$ kg ≅ 938.3 Mev.

8. الطول الموجي الكومتوني للبروتى $= \frac{h}{m_p c} = 1.321 \times 10^{-15}$ m

9. الكتلة الساكنة للنيوترون $= m_n = 1.675 \times 10^{-27}$ kg = 939.6 Mev.

10. ثابت بولتزمان $= k = 1.381 \times 10^{-23}$ J/°K

11. ثابت ديراك $= \frac{h}{2\pi} = \hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ J.s

12. عدد افوجادرو = $N_A = 6.023 \times 10^{23}$ $mole^{-1}$

13. الثابت الاول للاشعاع = $C_1 = 2\pi hc^2 = 3.741 \times 10^{-16}$ $W.m^2$

14. الثابت الثاني للاشعاع = $C_2 = \frac{hc}{k} = 1.439 \times 10^{-2}$ $m.°K$

15. ثابت ستيفان بولتزمان = $\sigma = 5.670 \times 10^{-8}$ $W.m^{-2}.°K^{-4}$

16. ثابت ريدبرج = $R_\infty = 1.097 \times 10^{7}$ m^{-1}

17. ثابت التركيب الدقيق = $\alpha = \frac{1}{137}$

18. نصف قطر المدار الاول في اطار نظرية بوهر = $e_0 = 5.292 \times 10^{-11}$ m

تذييل رقم (٢)

لمحة عن بعض العلماء الذين شاركوا عن طريق جهودهم التي اتسمت بالاسلوب العلمي الدقيق في صياغة علم ميكانيكا الكم ، وسوف نسرد ذكر هؤلاء العلماء على التوالي تبعا لترتيب الحرف الذي يبدأ به اسم كل عالم وليس تبعا للتسلسل التاريخي كما هو موضح بالباب الاول من الكتاب الحالي :

١ ــ البرت "اينشتين" (١٨٧٩ ــ ١٩٥٥) : Albert EINSTEIN

وُلد في بلدة "أُلم" بالمانيا ودرس في معهد التكنولوجيا بزيوريخ بسويسرا وحصل على الدبلوم في ١٩٠٠ وخلال الخمس سنوات التالية لذلك قام بنشر ثلاث بحوث اساسية الاول منها تناول موضوع "الانبعاث الكهروضوئي" والثاني تناول موضوع "الحركة البراونية" اما الثالث فقد تناول موضوع جديد للغاية وهو "اساسيات النظرية النسبية الخاصة" والتي ارست مفاهيم جديدة تماما للفكر العلمي .

ثم عمل مديرا لمعهد القيصر ببرلين .

وحصل على جائزة نوبل في ١٩٢١ .

ثم هاجر في ١٩٣٣ الى امريكا وعمل استاذا للفيزياء بمعهد الدراسات المتقدمة بجامعة برنستون .

ويعتبر اينشتين اعظم عالم فيزياء في القرن الحالي وواحد من اكبر العلماء على مر العصور .

٢ ـ نِيلْز هنريك "بُوهر" (١٨٨٥ ـ ١٩٦٢) Niels Henrick BOHR

ولد بكوبنهاجن بالدانمرك ودرس بجامعتها ثم ذهب الى انجلترا لتكملة دراسته تحت اشراف العالم البريطاني "رَذَرفُورد" للحصول على الدكتوراه من جامعة مانشستر وبعد ذلك في ١٩١٦ رجع الى كوبنهاجن ليعمل استاذا للفيزياء النظرية بجامعتها ثم انشأ معهد "بوهر" للفيزياء النظرية في ١٩٢٢ ولايزال هذا المعهد مركزا دوليا يلتقي فيه اعلام البحث العلمي في مجال الفيزياء النووية وفيزياء الجسيمات الاولية واصبح نموذجا لعدة مراكز دولية في عديد من البلدان مثل ايرلندا وامريكا وايطاليا والهند •

وفي نفس عام ١٩٢٢ حصل على جائزة نوبل •

ولقد اوضح بوهر بنظرياته للتركيب الذرى والتركيب النووى للمادة الطريق للعديد من الباحثين الذين اضافوا الكثير من المفاهيم الحديثة لتركيب المادة مثل فايزكوف وبيتا وفيشباخ وفايزاكر وغيرهم •

٣ ـ ماكس "بُوْرن" (١٨٨٢ ـ ١٩٧٥) Max BORN

ولد في برسلاو بالمانيا حيث بدأ دراسته لعلم الرياضيات ثم تابع تلك الدراسة في كل من هايدلبرج وزيورخ وجوتنجن ثم اكمل دراسته في علم الفيزياء • وعين استاذا للفيزياء في ١٩٢٣ بجامعة جوتنجن وبقى بها حتى هاجر لاسكتلاندا ليعمل استاذا للفيزياء بجامعة ادنبره •

وحصل على جائزة نوبل في ١٩٥٤ •

ولقد شارك بورن في تقديم العديد من اساسيات نظرية ميكانيكا الكم وهو اول من اوضح المفهوم الاحصائي في نظرية الكم وبهذا فتح الباب للتطبيقات العديدة العملية لتلك النظرية في مجال الفيزياء والكيمياء والتكنولوجيا •

٤ ـ لوى فيكتور " دى برولى " (١٨٩٢ ـ ١٩٧٦)

Louis Vector De BROGLIE

ولد ببلدة ديب بفرنسا وبدأ دراسته الجامعية باختيار علم التاريخ ثم فضل تكملة تلك الدراسة فى مجال الفيزياء وحصل على درجة الدكتوراه من جامعة باريس فى ١٩٢٤، حيث عين بعد ذلك استاذا للفيزياء بجامعة باريس ومعهد السوربون .

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٢٩ .

واهم اعماله خاصة بنظرية الفوتونات والتماثل بين الحركة الجسيمية الماديـــة والحركة الموجية المصاحبة لكل مخلوق من المخلوقات . والعبرة فقط بقدرتنا على الكشف عن تلك الحركة الموجية .

٤ ـ بول موريس " ديراك " (١٩٠٢ ـ ١٩٨١) Paul Maurice DIRAC

ولد ببريستول بانجلترا وبدأ دراسته الجامعية بعلم الهندسة الكهربية ثـــم اكمل تلك الدراسة فى مجال الفيزياء النظرية ثم عين فى ١٩٣٢ استاذا للرياضيـــات بجامعة كامبردج بانجلترا (وهو نفس العام الذى تحقق فيه تجريبيا ولأول مرة صحـــة النظرية النسبية للالكترون التى كان قد نشرها فى ١٩٢٨)، وبهذا فتح الباب امـــام المفهوم الشامل لمعنى الجسيمات الاولية المضادة بمعنى ان لكل جسيم هناك جسيـــم مضاد ، اذ منذ اكتشاف الالكترون المضاد " البوزيترون " بواسطة العالم أندرســـون باستخدام غرفـة السحابـة توالت الاكتشافات الاخرى مثل الميزون ميون المضاد فـــى ١٩٣٨ والبيون المضاد فى ١٩٤٧ والبيون المتعادل الضاد فى ١٩٥١ والبروتـــون المضاد فى ١٩٥٥ والنيوترون المضاد فى ١٩٦٣ وهكذا . ومعظم تلك الاكتشافـــات باستخدام الكاشفات البصرية مثل المستحلبات النووية وغرفة الفقاعة وغرفة الشرارة ولذلـــك لاتدع مجالا لاى شك فى صحتها .

٥ ـ انريكو " فيرمى " (١٩٠١ ـ ١٩٥٤) Enrico FERMI

ولد فى روما بايطاليا وحصل على الدكتوراه من جامعة بيزا فى ١٩٢٦ وفى عـام ١٩٣٠ عين استاذا للفيزياء النظرية بجامعة روما • وقبل بداية الحرب العالمية الثانية هاجر الى امريكا ليشغل وظيفة استاذ للفيزياء التجريبية بجامعة كولومبيا ثم جامعـة شيكاغو •

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٣٨ •

ويتميز فيرمى بأن ابحاثه اتسمت بالشمولية فى علم الفيزياء مع العمق الغزير فى كـل ففى مجال الفيزياء الاحصائية هناك الميكانيكا الاحصائية المعروفة باسمه (مشاركة مـع ديراك الذى توصل اليها بمفرده كذلك) ، وفى مجال الفيزياء النووية قاد الفريـق الامريكى الذى نجح فى تصنيع اول قنبلة ذرية ، وفى مجال فيزياء الجسيمات الاوليـة كان اول من اجرى التجارب الخاصة بالتفاعلات النووية للميزونات البيونية واول من اشـار الى وجود مايسمى الان بالجسيمات الاولية الرنينية •

٦ ـ فرنر كارل " هايزنبرج " (١٩٠١ ـ ١٩٧٦)

Werner Karl HEISENBERG

ولد ببلدة فارتبرج بالمانيا وحصل على الدكتوراه من جامعة ميونخ تحت اشـراف العالم سمرفلد ثم اشتغل مع العالم ماكس بورن ثم مع العالم بوهر بمعهد بكوبنهاجـن • وعين استاذا للفيزياء بجامعة برلين ثم رئيسا لمعهد ماكس بلانك ببرلين وجوتنجـن •

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٣٢ •

واهم اعماله هو صياغة ميكانيكا الكم بطريقة المصفوفات وصياغة معادلة الحركة فـى ميكانيكا الكم التى تقابل معادلة نيوتن فى الميكانيكا الكلاسيكية وكذلك اكتشافه لمبـدأ اللاتحديد والذى ادى الى اكتشافات تجريبية عديدة من اهمها عدم امكانية تواجـد

الالكترون داخل نواه الذرة كأحد المكونات الدائمة لها • الى ان تم بالفعل اكتشاف النيوترون وترسيخ المفهوم الصحيح للتركيب النووى فى اطار قاعدة الحركة المغزليــــة النظيرية والتى اوضحت الطريق الى اكتشاف العديد من الجسيمات الاولية والجسيمــات الرنينية •

٧ ـ روبرت اندرو " ميليكان " (١٨٦٨ ـ ١٩٥٣) :

Robert Andrew MILLIKAN

ولد بموريسون بولاية الينوى بامريكا واصبح استاذا للفيزياء التجريبية بجامعــة شيكاغو ، ولقد كان مثالا فى الصبر والاخلاص فى اداء البحث العلمى اذ كانت بعــض التجارب تتطلب منه المكوث الى جهازه واستكمال القياسات التجريبية لمدة عشرين ساعــة متواصلة حتى انتهت تلك المجهودات باكتشافه لشحنة الالكترون كوحدة للشحنـــــات الكهربية غير قابلة للتجزىء وللان اوضحت التجارب الخاصة بجسيمات الكوارك صحــــة هذا المفهوم •

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٢٣ •

٨ ـ فولفجانج " باولى " (١٩٠٠ ـ ١٩٥٨) : Wolfgang PAULI

ولد فى فيينا بالنمسا وحصل على الدكتوراه فى ١٩٢١ ثم عمل بعض الوقت مــــع العالم بوهر بكوبنهاجن ثم عين استاذا للفيزياء النظرية بجامعة زيوريخ بسويسرا •

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٤٥ •

ويُعد باولى من ابرز علماء الفيزياء النظرية فى القرن العشرين فهو اول مـــــن استخدم جبر المصفوفات لشرح الحركة المغزلية للالكترون وبهذا توصل الى تفسيــــر العديد من الظواهر الخاصة بالاطياف الذرية والنووية المرتبطة بالتفاعلات الكهرومغناطيسية •

كذلك فانه توصل الى اكتشاف مبدأ الاستبعاد المعروف باسمه والذى يُعتبر اساس لتفهم العديد من الظواهر المرتبطة بالتركيب الذرى والتركيب النووى للمادة والسلوك الاحصائى للجسيمات الاولية ، ومن اهمها الترتيب الدورى للعناصر تبعا لاطار مندليف .

٩ ـ ماكس كارل "بلانك" (١٨٥٨ ـ ١٩٤٧) Max Karl PLANCK

ولد ببلدة كيل بالمانيا ودرس فى جامعتى ميونيخ وبرلين وحصل على الدكتوراه فى ١٨٧٩ وعين استاذا للفيزياء النظرية بجامعة برلين فى ١٨٩٩ وهو نفس العام الذى وفق فيه لوضع التفسير الصحيح للطيف الاشعاعى الكهرومغناطيسى المنبعث من الاجسام تامة السواد والذى عجز العديد من العلماء البارزين (امثال جينز ورالى وفين) من تفسيره . وقد بنى هذا التفسير على اساس التقدم بفكرة الكم الاشعاعى وهى الفكرة التى تعتبر اللبنة الاولى فى البناء المتكامل لميكانيكا الكم ويعتبر بلانك استاذا لجميع من تولوا صياغة هذه النظرية كما تعلمها الان مثل هايزنبرج وشرودنجر وبورن وغيرهم .

وحصل بلانك على جائزة نوبل فى ١٩١٩ .

وواصل مشاركته فى التقدم العلمى لهذه النظرية .

١٠ـ سيسيل فرانك "باول" (١٩٠١ ـ ١٩٦٩) Cecil Frank POWELL

ولد ببريستول بانجلترا حيث اكمل دراسته لدرجة الدكتوراه فى ١٩٢٧ ثم تدرج فى وظائف الجامعة نفسها حتى اصبح استاذا للفيزياء التجريبية فى ١٩٤١ .

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٥٠ .

ولقد وُفّق باول فى تطوير وتجهيز مايعرف بالمستحلب الفوتوغرافى النووى والـذى اوضح بما لايدع للشك العلاقة الصحيحة بين الميونات والبيونات وان الاخيرة هى كمات المجال النووى وبذلك تم تفسير القوى النووية على اساس صحيح بعد حوالى خمسـة عشر عاما من التضارب بين التفكير النظرى والمشاهدة التجريبية ، كما وفق باول فـى التعرف على توزيع العناصر المختلفة سواء الخفيفة منها والثقيلة فى الاشعاعات الكونيـة الاولية مما اوضح الطريق لتفهم العديد من ظواهر تلك الاشعاعات وخصوصـا التفاعلات النووية والكهرومغناطيسية لها اثناء مرورها فى الغلاف الجوى .

وجميع تلك المشاهدات عمّق مفهوم الكم الاشعاعى والحركة الموجية للجسيمـات الاولية .

١١ـ ارنست " رذرفورد " (١٨٧١ ـ ١٩٣٧) Ernest RUTHERFORD

ولد فى بلدة نلسون بنيوزيلندا ودرس بها ثم رحل الى كندا حيث عمل استـاذا للفيزياء التجريبية بجامعة ماكجل بمونتريال . ثم عين استاذا بجامعة مانشستـر بانجلترا فى ١٩٠٧ وبعد ذلك شغل نفس المنصب الذى كان يشغله العالم "طومسون" مكتشف الالكترون بجامعة كامبردج .

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٠٨ " فى علم الكيمياء " .

وتتميز ابحاث رذرفورد التجريبية فى مجال الفيزياء النووية والكيمياء الاشعاعيـة بمهارة فريدة وقدرة فائقة على تحليل المشاهدات التجريبية التى يقابلها . وهو الـذى اوضح الطريق وأرسى الاساس للتركيب الذرى والنووى الذى طوره بوهر وبقية تلاميـذ رذرفورد وجند الباحثين الشبان لتطوير مفهوم الكم الذى قدمه بلانك حتى أخذت نظريـة الكم الاطار الشامل لها .

١٢ـ ارفين " شرودنجر " (١٨٨٧ ـ ١٩٦١) : Erwin Schrodinger

ولد بفيينا بالنمسا وحصل على الدكتوراه من جامعتها فى ١٩١٠ ثم شغل وظيفة استاذ الفيزياء بجامعة زيوريخ بسويسرا وعمل خمس سنوات بعد ذلك بجامعة برلين قبل هجرته الى ايرلندا فى ١٩٣٣ ليعمل استاذا فى معهد البحوث المتقدمة بدبلن .

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٣٣ .

وتعد بحوث شرودنجر الخاصة بالاطار الرياضى لنظرية ميكانيكا الكم هى المنهج الذى تبدأ عنده جميع الابحاث الخاصة بهذه النظرية للان . وينظر لشرودنجر على انه " نيوتن العصر الحديث " .

١٣ـ ارنولد سمرفلد " (١٨٦٨ ـ ١٩٥١) Arnold Sommerfeld

ولد بكونجزبرج بالمانيا وشغل لعدة سنوات وظيفة استاذ للفيزياء بجامعة ميونخ .

ولقد شارك بابحاثه فى تقدم اسس ميكانيكا الكم وخصوصا فيما يتعلق بالتركيب الذرى للمادة وادخال تطبيقات النظرية النسبية الخاصة فى هذا الشأن مما ادى الى البدء فى استخدام مفهوم ثابت التركيب الدقيق فى الفيزياء والذى يظهر فى جميع المعالجات الرياضية للتفاعلات الكهرومغناطيسية بين الجسيمات الاولية والمادة .

١٤ـ جوزيف جون " طومسون " (١٨٥٦ ـ ١٩٤٠) Joseph John THOMSON

ولد فى مانشستر بانجلترا ودرس بها ثم عين استاذا للفيزياء التجريبية بجامعة كامبردج والمعهد الملكى بلندن . وهو اول من قام بتعيين النسبة بين الشحنة والكتلة للالكترون وتعرّف على الالكترون كأحد الجسيمات الاولية الداخلة فى بناء جميع

ذرات المواد المختلفة • كما انه اكتشف نظائر العنصر "النيون" •

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٠٦ •

١٥ـ هيديكو يوكاوا (١٩٠٧ ـ ١٩٨٠) Hideki YUKAWA

ولد ببلدة كيوتو باليابان حيث حصل على الدكتوراه من جامعتها فى ١٩٢٩ •

وحصل على جائزة نوبل فى ١٩٤٩ •

وهو اول من فكر فى تفسير التفاعلات بين الجسيمات النووية عن طريق تبادل جسيمات الميزونات وذلك فى ١٩٣٥ (ولكن لم تتوافق نظريته مع المشاهدات التجريبية الا فى ١٩٤٧ بعد اكتشاف الميزونات البيونية التى تتميز بتفاعلاتها القوية مع الجسيمات النووية) وهذا التفكير هو امتداد لنمط التفاعلات الكهرومغناطيسية بين الجسيمات ذات الشحنات الكهربية عن طريق تبادل كم المجال الكهرومغناطيسى "الفوتون" •

تذييـــل رقـم (٣)

قائمة بأسماء بعض الكتب المرتبطة بموضوع "ميكانيكا الكم" الجزء الاول

	Author	Title	Publisher	Year
1	Andrade, E.,	"An Approach to Modern Physics"	Doubleday	1957
2	Bates, D.,	"Quantum Theory 1"	Academic Press	1961
3	Baym, G.,	"Lectures on Quantum Mechanics"	Benjamin	1969
4	Bellman, R.,	"Perturbation Techniques in Mathematics, Physics and Engineering"	Dover	1966
5	Bethe, H., Salpeter, E.,	"Qutnum Mechanics for one-and two-electron Atoms"	Academic Press	1957
6	Blass, G.,	"Theoretical Physics"	Appleton	1962
7	Bohm, D.,	"Quantum Mechanics"	Prentice-Hall	1951
8	Born, M.,	"Atomic Physics"	Blackie	1962
9	Courant, R., & Hilbert, D.,	"Methods of Mathematical Physics"	Interscience	1953

	Author	Title	Publisher	Year
10	de Broglie, L.	"The Revolution in Physics"	Noonday	1953
11	Dirac, P.,	"Quantum Mechanics"	Oxford	1958
12	Dwight, H.,	"Tables of Integrals and other Mathematical Data"	Macmillan	1961
13	Edmonds, A.,	"Angular Momentum in Quantum Mechanics"	Princeton	1957
14	Feynman, R., Leighton, R., Sands, M.,	"The Feynmann Lectures on Physics" IV	McGraw-Hill	1965
15	Flügge, S., (ed.)	"Practical Quantum Mechanics" 1,2,	Springer-Verlag	1971
16	Fredrick, U.,	"Theory of Linear Operators in Hilbert Space"	McGraw-Hill	1961
17	French, A.,	"Principles of Modern Physics"	Wiley	1958
18	Friedman, B.,	"Principles and Techniques of Applied Mathematics"	Wiley	1956

	Author	Title	Publisher	Year
19	Goldman, I., Krivchenkov, V.,	"Problems in Quantum Mechanics".	Pergamon	1961
20	Goldstein, H.,	"Classical Mechanics"	Addison-Wesley	1956
21	Grechko et al.,	"Problems in Theoretical Physics"	Mir	1977
22	Hameka, H.,	"Advanced Quantum Chemistry"	Addison-Wesley	1965
23	Hartree, D.,	"The Calculation of Atomic Structure"	Wiley	1957
24	Hoffman, R.,	"The Strange Story of the Photon"	Dover	1959
25	Jammer, G.,	"The Conceptual Development of Quantum Mechanics"	McGraw-Hill	1966
26	Kittel, C.,	"Introduction to Solid State Physics"	Wiley	1971
27	Kogan, V.,	"Problems in Quantum Mechanics"	Prentice-Hall	1963
28	Kraywicki, A.,	"Mathematics for Physicists"	Harper & Row	1967
29	Kuhn, H.	"Atomic Spectra"	Academic-Press	1969

	Author	Title	Publisher	Year
30	Loudon, R.,	"The Quantum Theory of Light"	Oxford	1973
31	Margenau, H. and Murphy, G.,	"Mathematics of Physics and Chemistry"	Van Nostrand	1956
32	Menzel, D.,	"Mathematical Physics"	Dover	1961
33	Messiah, A.,	"Quantum Mechanics"	North-Holland	1970
34	Morse, P., and Feshbach, H.,	"Methods of Theoretical Physics"	McGraw-Hill	1966
35	Mott, N., and Massey, H.,	"The theory of Atomic Collisions"	Oxford	1965
36	Mott, N., and Sneddon, I.,	"Wave Mechanics and its Applications"	Oxford	1948
37	Park, D.,	"Introduction to Quantum Mechanics"	McGraw-Hill	1974
38	Perkins, D.,	"High Energy Physics"	Addison-Wesley	1987
39	Ramsey, N.,	"Molecular Beams"	Oxford	1963
40	Richtmyer, F., Kennard, E., and Cooper, J.,	"Introduction to Modern Physics"	McGraw-Hill	1969
41	Rose, M.,	"Elementary Theory of Angular Momentum"	Wiley	1957

	Author	Title	Publisher	Year
42	Rossi, B.,	"Optics"	Addison-Wesley	1957
43	Saxon, D.,	"Elementary Quantum Mechanics"	Holden Day	1964
44	Schiff, L.,	"Quantum Mechanics"	McGraw-Hill	1968
45	Slater, J.,	"Quantum Theory of Atomic Structure", 1, 2	McGraw-Hill	1960
46	Taylor, P.,	"A Quantum Approach to the Solid State"	Prentice-Hill	1970
47	Tomonaga, S.,	"Quantum Mechanics"	North-Holland	1962
48	Wichmann, E.,	"Quantum Physics" Vol. 5 Berkeley Physics.	McGraw-Hill	1967

دار الحكيم للطباعة
١٦ ش التعاون - مدينة الجدول
خلف كوبري عبود - شبرا القاهرة

رقم الايداع بدار الكتب ٥٢٠٢ / ١٩٨٩



دكتور عبد الرحمن فكرى

* ولد بالقاهرة فى عام ١٩٣٢ .
* حصل على بكالوريوس علوم - الدرجة الخاصة فى الفيزياء بتقدير ممتاز مع مرتبة الشرف الأولى عام ١٩٥٣ من كلية العلوم جامعة عين شمس .
* ابتعث عام ١٩٥٦ الى جامعة بريستول «انجلترا» وحصل على الدكتوراه فى فيزياء الطاقة العالية عام ١٩٥٩ .
* شغل وظيفة مدرس الفيزياء بكلية الهندسة جامعة عين شمس ١٩٥٩ ثم عين أستاذاً مساعداً فى نفس الكلية عام ١٩٦٦ ثم عين أستاذاً بنفس الكلية عام ١٩٧٦ .
* أعير للعمل بكلية العلوم «جامعة الكويت» وكذلك إلى «جامعة أم القرى» بمكة المكرمة .
* شارك فى أبحاث علمية مع جامعات لندن وبركلى والمركز الاوروبى للبحوث النووية .
* له مؤلفات عدة فى فروع الفيزياء المختلفة أهمها كتب فى :
  - فيزياء الموجات والذبذبات
  - الفيزياء الذرية
  - الفيزياء النووية
  - الديناميكا الحرارية

دكتور محمد عبد الهادى كامل القدوى

* ولد بمدينة العياط بالجيزة فى عام ١٩٣٩
* حصل على بكالوريوس علوم وتربية من كلية المعلمين بالقاهرة عام ١٩٦٠ .
* حصل على دبلوم خاص فى التربية وعلم النفس من كلية التربية جامعة عين شمس بالقاهرة عام ١٩٦٤ .
* حصل على بكالوريوس علوم الدرجة الخاصة فى الفيزياء من كلية العلوم جامعة القاهرة ١٩٦٨ بتقدير ممتاز مع مرتبة الشرف الأولى .
* التحق بدراسات الماجستير بجامعة القاهرة ثم لم يلبث بعد عام أن أوفدته جامعة عين شمس إلى موسكو حيث حصل على درجة الكانديدات بامتياز عام ١٩٧٣ من تلك الجامعة بروسيا .
* تدرج فى السلك الجامعى بجامعة عين شمس الى الدرجة الحالية كأستاذ للفيزياء النظرية.
* من أهم مؤلفاته كتاب «كوكب ... ١٩٦٤ وكتاب «الفيزياء الم... آخرين عام ١٩٧٩ ، وكتاب ... النسبية الخاصة» عام ١٩٨٠ ... الزميل الحالى .

